

UNIVERSITE DU QUEBEC A TROIS-RIVIERES

MEMOIRE PRESENTE A
L'UNIVERSITE DU QUEBEC A TROIS-RIVIERES

COMME EXIGENCE PARTIELLE
DE LA MAITRISE ES SCIENCES (PHYSIQUE)

PAR
ALAIN WILKIN

ETUDE DE LA FONCTION D'ONDE DU FRAGMENT
MOLECULAIRE CENTRAL DE LA CHLOROPHYLLE

SEPTEMBRE 1984

Université du Québec à Trois-Rivières

Service de la bibliothèque

Avertissement

L'auteur de ce mémoire ou de cette thèse a autorisé l'Université du Québec à Trois-Rivières à diffuser, à des fins non lucratives, une copie de son mémoire ou de sa thèse.

Cette diffusion n'entraîne pas une renonciation de la part de l'auteur à ses droits de propriété intellectuelle, incluant le droit d'auteur, sur ce mémoire ou cette thèse. Notamment, la reproduction ou la publication de la totalité ou d'une partie importante de ce mémoire ou de cette thèse requiert son autorisation.

RESUME

Le fragment moléculaire $\text{Mg}^{2+}\text{N}_4\text{O}$ est étudié dans une géométrie idéalisée, pyramidale à base carrée, avec les longueurs de liaisons que l'on connaît pour la chlorophylle. On veut calculer sa fonction d'onde et ainsi déterminer les types d'interactions entre les différents atomes. Aussi, les changements apportés par l'atome d'oxygène à la structure électronique de Mg^{2+}N_4 veulent être étudiés. Pour calculer la fonction d'onde dans un schème ab initio, on utilise la méthode HF-CSC-CLOA-OM (Hartree-Fock - Champ "Self-Consistent" - Combinaisons Linéaires d'Orbitales Atomiques des Orbitales Moléculaires). On exprime les orbitales atomiques dans une base de fonctions gaussiennes. Dans la base minimum, chaque orbitale atomique est exprimée par une combinaison linéaire de trois gaussiennes. Dans la base de valence divisée, créée à partir des fonctions de la base minimum, chaque orbitale atomique de valence est exprimée par une combinaison linéaire de deux gaussiennes et d'une autre gaussienne. On ajoute aussi une fonction de polarisation sur l'atome de magnésium. Dans chacun des cas, on tente de déterminer la configuration électronique produisant l'énergie totale la plus basse. Des analyses de populations de Mulliken et de recouvrement sont réalisées par le biais des fonctions d'onde calculées. Le système de programmes POLYATOM (version 2) est utilisé pour réaliser les différents calculs. Les programmes PA20A et PA20B créent des listes d'étiquettes des intégrales; PA30A et PA30B calculent ces intégrales; PA40

calcule la fonction d'onde du type "closed-shell"; PA41 calcule la fonction d'onde du type "open-shell"; PA59 calcule les populations de Mulliken et de recouvrement et PA60 calcule différentes propriétés monoélectroniques. Les résultats montrent que les types d'interactions pour le fragment $\text{Mg}^{2+}\text{N}_4\text{O}$ sont essentiellement ioniques. On obtient une charge résiduelle de -0,3 sur l'atome d'oxygène. L'ajout de ce dernier à la structure Mg^{2+}N_4 induit une charge légèrement positive (+0,07) sur les azotes qui étaient au préalable essentiellement nulle (-0,004). La conformation $\text{Mg}^{2+}\text{N}_4\text{O}$ avec l'atome de magnésium au-dessus du plan formé par les quatre azotes est énergétiquement défavorisée par rapport à celle où le magnésium est dans ce plan.

REMERCIEMENTS

Je remercie d'abord mes deux directeurs de recherche, Roger M. Leblanc et Adel F. Antippa, pour leur aide apportée à la réalisation de ce mémoire.

Egalement, je suis reconnaissant à J. Andzelm pour ses conseils dans le domaine de la chimie quantique et à C. Chouinard pour son aide en informatique.

TABLE DES MATIERES

	Page
RESUME.....	ii
REMERCIEMENTS.....	iv
LISTE DES TABLEAUX.....	viii
LISTE DES FIGURES.....	xii
LISTE DES SYMBOLES ET ABREVIATIONS.....	xiii
I. INTRODUCTION	
A. Position du problème.....	1
B. Littérature.....	2
C. Objectifs.....	13
II. THEORIE	
A. Formalisme général.	
1. Equation de Schrödinger.....	14
2. Equations de Hartree-Fock.....	13
3. Fonctions de base.....	25
B. Système de programmes POLYATOM.	
1. Description générale de POLYATOM.....	30
2. Description des programmes PA20A et PA20B.....	31
3. Description des programmes PA30A et PA30B.....	32

4. Description du programme PA40.....	35
5. Description du programme PA41.....	41
6. Description du programme PA59.....	41
7. Description du programme PA60.....	43
III.CALCULS	
A. Détermination de la base.....	45
B. Détermination de la matrice de transformation.....	48
C. Détermination des fonctions de symétrie....	55
D. Détermination de la configuration électronique.....	56
E. Calcul des OM.	
1. Le fragment $\text{Mg}^{2+}\text{N}_4\text{O}$	57
2. Le fragment Mg^{2+}N_4	59
3. Le fragment MgN_4	60
IV. DISCUSSION.....	229
BIBLIOGRAPHIE.....	233
ANNEXES	
A. Système du type "open-shell".....	237
B. Notation d'une base.....	240
C. Nouvelles versions des sous-routines PACK et UNPACK.....	241
D. Formats des données pour PA20A et PA20B.....	243
E. Formats des données pour PA30A et PA30B.....	244
F. Formats des données pour PA40.....	246
G. Formats des données pour PA41.....	248

H. Formats des données pour PA59.....	249
I. Formats des données pour PA60.....	251
J. Tables des caractères des groupes C_{4v} et D_{4h}	252

LISTE DES TABLEAUX

Tableaux	Page
1. Base de FG contractées à 3G pour N, O, Mg et Mg^{2+} ...	46
2. Numérotation des fonctions de la base minimum de $Mg^{2+}N_4O$	52
3. Données pour PA20A du fragment $Mg^{2+}N_4O$ dans une base minimum.....	62
4. Données pour PA20B du fragment $Mg^{2+}N_4O$ dans une base minimum.....	63
5. Données pour PA30A du fragment $Mg^{2+}N_4O$ dans une base minimum.....	64
6. Données pour PA30B du fragment $Mg^{2+}N_4O$ dans une base minimum.....	65
7. Données pour PA40 du fragment $Mg^{2+}N_4O$ dans une base minimum.....	66
8. Energies relatives à l'itération 100 pour $Mg^{2+}N_4O$...	67
9. OM de l'itération 100 pour $Mg^{2+}N_4O$	68
10. Données pour PA59 du fragment $Mg^{2+}N_4O$ dans une base minimum.....	71
11. Analyse de population de Mulliken pour $Mg^{2+}N_4O$	77
12. Analyse de population de recouvrement pour $Mg^{2+}N_4O$..	83
13. Données pour PA60 du fragment $Mg^{2+}N_4O$ dans une base minimum.....	85
14. Moment dipolaire de $Mg^{2+}N_4O$	87
15. Moments quadrupolaires de $Mg^{2+}N_4O$	88

16.	Données pour PA20A du fragment $\text{Mg}^{2+}\text{N}_4\text{O}$ dans une base de VD.....	89
17.	Données pour PA30A du fragment $\text{Mg}^{2+}\text{N}_4\text{O}$ dans une base de VD.....	90
18.	Données pour PA40 du fragment $\text{Mg}^{2+}\text{N}_4\text{O}$ dans une base de VD.....	92
19.	Energies relatives à l'itération 150 pour $\text{Mg}^{2+}\text{N}_4\text{O}$...	93
20.	OM de l'itération 150 pour $\text{Mg}^{2+}\text{N}_4\text{O}$	94
21.	Analyse de population de Mulliken pour $\text{Mg}^{2+}\text{N}_4\text{O}$	102
22.	Analyse de population de recouvrement pour $\text{Mg}^{2+}\text{N}_4\text{O}$..	113
23.	Moment dipolaire de $\text{Mg}^{2+}\text{N}_4\text{O}$	115
24.	Energies relatives à l'itération 150 pour $\text{Mg}^{2+}\text{N}_4\text{O}$...	116
25.	OM de l'itération 150 pour $\text{Mg}^{2+}\text{N}_4\text{O}$	117
26.	Analyse de population de Mulliken pour $\text{Mg}^{2+}\text{N}_4\text{O}$	125
27.	Analyse de population de recouvrement pour $\text{Mg}^{2+}\text{N}_4\text{O}$..	135
28.	Moment dipolaire de $\text{Mg}^{2+}\text{N}_4\text{O}$	137
29.	Moment quadrupolaire de $\text{Mg}^{2+}\text{N}_4\text{O}$	138
30.	Données pour PA20A du fragment Mg^{2+}N_4 dans une base minimum.....	139
31.	Données pour PA30A du fragment Mg^{2+}N_4 dans une base minimum.....	140
32.	Données pour PA40 du fragment Mg^{2+}N_4 dans une base minimum.....	141
33.	Energies relatives à l'itération 28 pour Mg^{2+}N_4	142
34.	Données pour PA40 du fragment Mg^{2+}N_4 dans une base minimum.....	143
35.	Energies relatives à l'itération 28 pour Mg^{2+}N_4	144

36.	OM de l'itération 28 pour Mg^{2+}N_4	145
37.	Analyse de population de Mulliken pour Mg^{2+}N_4	148
38.	Analyse de population de recouvrement pour Mg^{2+}N_4 ...	153
39.	Données pour PA41 du fragment Mg^{2+}N_4 dans une base minimum.....	155
40.	Energies relatives à l'itération 30 pour Mg^{2+}N_4	156
41.	Données pour PA41 du fragment Mg^{2+}N_4 dans une base minimum.....	157
42.	Energies relatives à l'itération 28 pour Mg^{2+}N_4	158
43.	Données pour PA41 du fragment Mg^{2+}N_4 dans une base minimum.....	159
44.	Energies relatives à l'itération 28 pour Mg^{2+}N_4	160
45.	OM de l'itération 28 pour Mg^{2+}N_4	161
46.	Analyse de population de Mulliken pour Mg^{2+}N_4	164
47.	Analyse de population de recouvrement pour Mg^{2+}N_4 ...	169
48.	Données pour PA20A du fragment Mg^{2+}N_4 dans une base de VD.....	171
49.	Données pour PA30A du fragment Mg^{2+}N_4 dans une base de VD.....	172
50.	Données pour PA40 du fragment Mg^{2+}N_4 dans une base de VD.....	174
51.	Energies relatives à l'itération 33 pour Mg^{2+}N_4	175
52.	OM de l'itération 33 pour Mg^{2+}N_4	176
53.	Analyse de population de Mulliken pour Mg^{2+}N_4	183
54.	Analyse de population de recouvrement pour Mg^{2+}N_4 ...	192
55.	Données pour PA41 du fragment Mg^{2+}N_4 dans une base de VD.....	194

56.	Energies relatives à l'itération 32 pour Mg^{2+}N_4	196
57.	OM de l'itération 32 pour Mg^{2+}N_4	197
58.	Analyse de population de Mulliken pour Mg^{2+}N_4	204
59.	Analyse de population de recouvrement pour Mg^{2+}N_4	213
60.	Données pour PA20A du fragment MgN_4 dans une base minimum.....	215
61.	Données pour PA30A du fragment MgN_4 dans une base minimum.....	216
62.	Données pour PA40 du fragment MgN_4 dans une base minimum.....	217
63.	Energies relatives à l'itération 12 pour MgN_4	218
64.	OM de l'itération 12 pour MgN_4	219
65.	Analyse de population de Mulliken pour MgN_4	222
66.	Analyse de population de recouvrement pour MgN_4	227

LISTE DES FIGURES

Figures	Page
1. Molécule de chlorophylle-a avec indication de la position 9 du groupement céto et molécule d'éthyle chlorophyllide-a.....	3
2. a) Molécule de porphine comme base libre; b) Molécule de porphine de béryllium, magnésium, calcium et aquomagnésium.....	4
3. Molécule de chlorine de magnésium.....	10
4. Dépendance radiale comparée de FS et FG.....	27
5. Géométrie de base du fragment $Mg^{2+}N_4O$	49
6. Positions des fonctions de la base minimum avec indication des phases pour le fragment $Mg^{2+}N_4O$	51

LISTE DES SYMBOLES ET ABREVIATIONS

\hat{H}	Opérateur hamiltonien.
\hat{F}	Opérateur de (Hartree-)Fock.
\hat{G}	Opérateur de recouvrement.
\hat{T}	Opérateur d'énergie cinétique.
\hat{V}	Opérateur d'attraction nucléaire.
\hat{M}	Opérateur de répulsion électronique.
\hat{P}	Opérateur de projection.
J	Intégrale de Coulomb.
K	Intégrale d'échange.
Ψ	Fonction d'onde déterminantale.
ϕ	Orbitale moléculaire.
χ	Orbitale atomique.
α, β	Fonctions d'onde de spin.
η	Fonction gaussienne primitive.
dv	Element de volume des coordonnées de l'espace tridimensionnel.
$d\tau$	Element de volume des coordonnées de l'espace tridimensionnel et de spin.
α	Exposant orbital d'une fonction gaussienne.
ζ	Exposant orbital d'une fonction de Slater.
$\langle F \rangle$	Valeur moyenne de la propriété F.
δ	Delta de Kronecker.
μ	Moment dipolaire électrique.

D	Matrice densité.
CLOA	Combinaison linéaire d'orbitales atomiques.
CSC	Champ self-consistent.
FG	Fonction Gaussienne.
FGSF	Fonction Gaussienne sphérique flottante.
FP	Fonction de polarisation.
FS	Fonction de Slater.
HE	Hückel étendue.
HFR	Hartree-Fock-Roothaan.
IC	Interaction de configurations.
NCRD	Négligence complète du recouvrement différentiel.
OA	Orbitale atomique.
OM	Orbitale moléculaire.
PAB	Population atomique brute.
PAN	Population atomique nette.
PR	Population de recouvrement.
PAT	Population atomique totale.
u.a.	Unité atomique ou hartree.
VD	Valence divisée.

CHAPITRE I

INTRODUCTION

I.A. Position du problème.

De par son rôle unique joué dans le processus de photosynthèse, la chlorophylle fait l'objet de nombreuses études. Un des aspects que l'on tente d'élucider est sa structure électronique.

Les complexes de porphyrine de Mg^{2+} , c'est-à-dire la chlorophylle et ses analogues structuraux, n'appartiennent ni à la classe des complexes purement ioniques (porphyrine Na^+ , K^+ , Rb^+ , Be^{2+} , Ca^{2+} par exemple), ni à la classe des complexes purement covalents (porphyrine Fe^{2+} , Fe^{3+} , Co^{2+} , Cu^{2+} , Zn^{2+} , Al^{3+} , Si^{4+} , Pt^{4+} par exemple) (Berezin, 1981), mais plutôt à une classe intermédiaire. Cette première constatation nous amène donc à nous intéresser à la structure électronique du fragment central contenant l'ion Mg^{2+} de la molécule de chlorophylle.

D'autre part, on sait que dans la chlorophylle monomérique l'atome de magnésium a un nombre de coordination formel de 4. Mais des interactions comme avec l'eau ou d'autres solvants sont très fréquentes (Cotton, 1972). Aussi, l'interaction avec le groupement céto à la position 9 (fig. 1) d'une autre molécule peut aussi s'effectuer. Des études ont montré que le magnésium, dans les cas mentionnés ci-dessus, serait

plutôt coordiné-5 que coordiné-6 (Cotton, 1972). Cette seconde constatation nous amène à considérer le fragment constitué d'un atome de magnésium lié à quatre atomes d'azote et un atome d'oxygène comme sujet d'étude de ce mémoire.

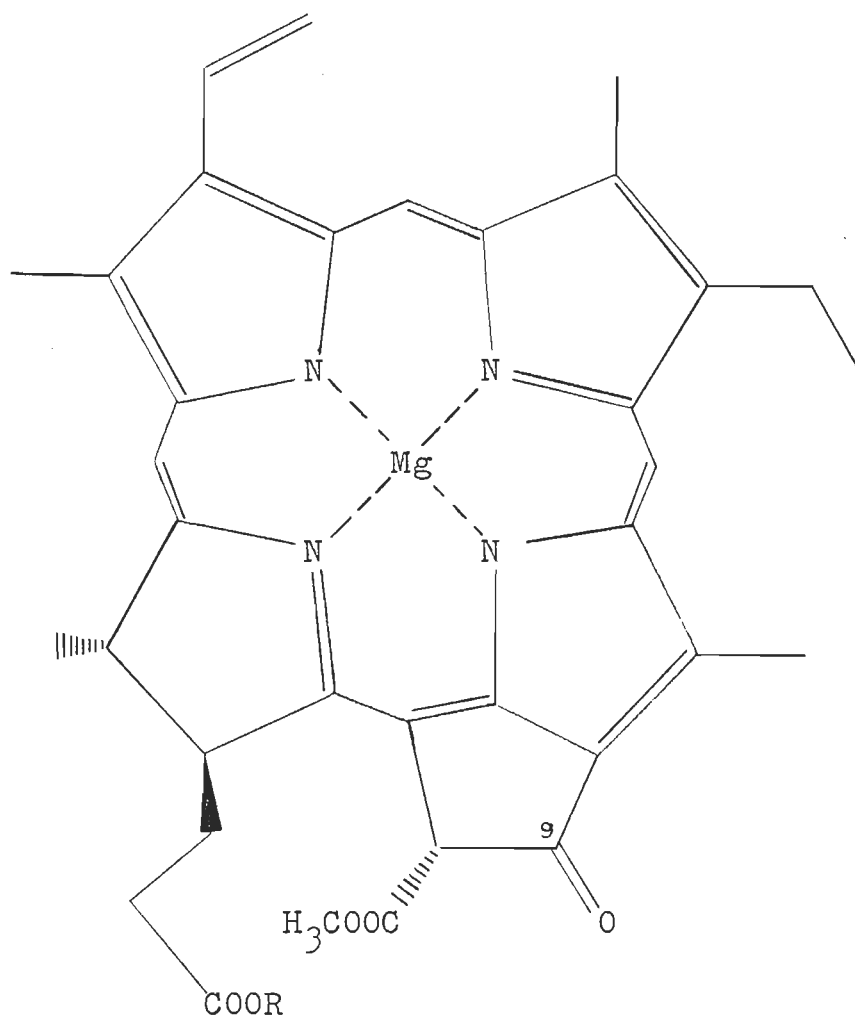
I.B. Littérature.

Il existe dans la littérature scientifique quelques travaux portant sur l'étude théorique de la structure électronique du magnésium dans un environnement similaire à celui du fragment $\text{Mg}^{2+}\text{N}_4\text{O}$. On va surtout s'intéresser aux méthodes de chimie quantique qui ont été utilisées dans ces travaux.

Des calculs par la méthode de Hückel étendue (HE) ont été réalisés pour les porphines de béryllium (fig. 2b), de magnésium (fig. 2b) et de calcium (fig. 2b) (Zerner, 1967). Cette méthode semi-empirique traite les électrons de valence séparément du reste. L'hamiltonien de valence est donné comme une somme d'hamiltoniens monoélectroniques, appelés hamiltoniens effectifs qu'on ne spécifie pas explicitement,

$$\hat{H}_{\text{val}} = \sum_i \hat{H}_{\text{eff}}(i) \quad (\text{I.B.1})$$

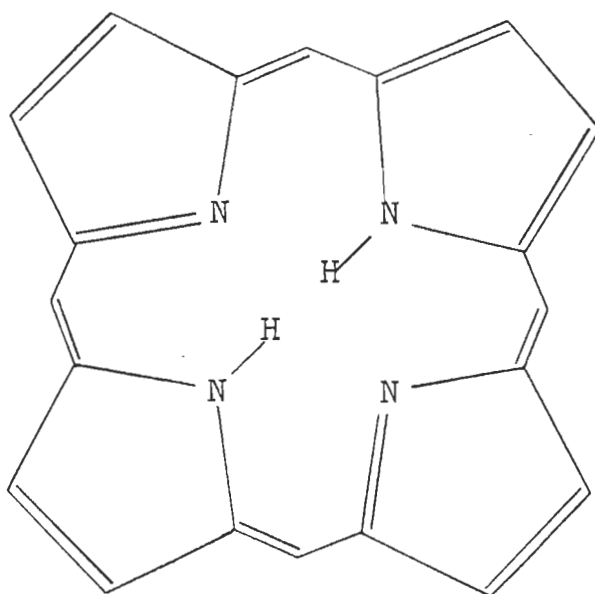
Les orbitales moléculaires (OM), ϕ_i , sont approximées comme des combinaisons linéaires des orbitales atomiques (OA) de valence des atomes, f_j ,



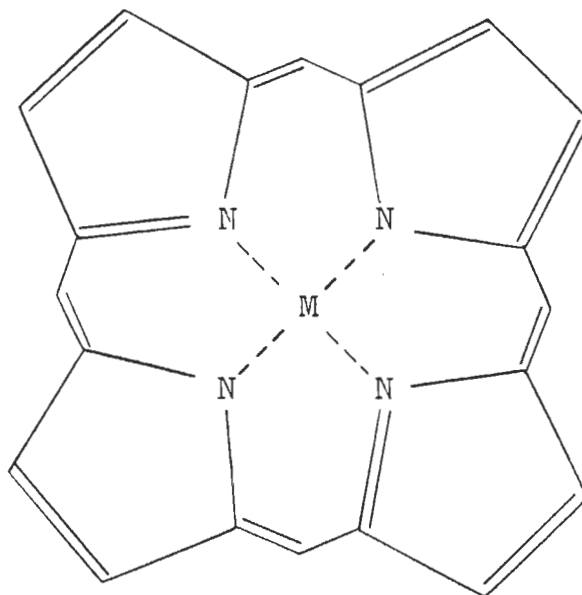
R=phytol; chlorophylle-a

R=C₂H₅ ; éthyle chlorophyllide-a

Figure 1. Molécule de chlorophylle-a avec indication de la position 9 du groupement céto et molécule d'éthyle chlorophyllide-a.



(a)



(b)

$M = \text{Be, Mg, Ca}$; porphine de béryllium, magnésium, calcium.

$M = \text{MgOH}_2$; porphine aquomagnésium.

Figure 2. a) Molécule de porphine comme base libre; b) Molécule de porphine de béryllium, magnésium, calcium et aquomagnésium.

$$\phi_i = \sum_j c_{ij} f_j \quad (\text{I.B.2})$$

Les OA sont habituellement des fonctions de Slater avec les exposants orbitaux ζ fixes (II.A.34). Considérant (I.B.1) on voit que le problème se divise en plusieurs problèmes aux valeurs propres à un électron,

$$\hat{H}_{\text{eff}}(i) \phi_i = e_i \phi_i \quad (\text{I.B.3})$$

avec,

$$E_{\text{val}} = \sum_i e_i \quad (\text{I.B.4})$$

où e_i est l'énergie de l'OM i et E_{val} est l'énergie totale de valence. L'application du théorème variationnel (II.A.7) à la fonction (I.B.2) conduit à l'équation séculaire,

$$\det (H_{jk}^{\text{eff}} - e_i S_{jk}) = 0 \quad (\text{I.B.5})$$

et aux équations pour les coefficients c_{ij} des OM,

$$\sum_k (H_{jk}^{\text{eff}} - e_i S_{jk}) c_{jk} = 0 \quad j=1,2,\dots \quad (\text{I.B.6})$$

où,

$$S_{jk} = \int f_j^* f_k d\tau \quad (\text{I.B.7})$$

$$H_{jk}^{\text{eff}} = \int f_j^* H_{\text{eff}} f_k d\tau \quad (\text{I.B.8})$$

Dans la méthode de HE toutes les intégrales S_{jk} sont calculées explicitement. Les intégrales H_{jk}^{eff} pour $j=k$ sont approximées comme moins le potentiel d'ionisation atomique de valence correspondant. Les autres intégrales H_{jk}^{eff} avec $j \neq k$ sont calculées par,

$$H_{jk}^{\text{eff}} = \frac{K}{2} (H_{jj}^{\text{eff}} + H_{kk}^{\text{eff}}) S_{jk} \quad (\text{I.B.9})$$

où K est une certaine constante numérique. Les calculs de Zerner et collaborateurs ont montré que les porphines de béryllium, de magnésium et de calcium devraient avoir à peu près la même structure électronique que les complexes des métaux de transition. On remarque la possibilité de transitions électroniques $\sigma \rightarrow \pi^*$ dans ces complexes et on démontre la plus grande importance de la liaison ionique du métal à la porphine.

D'autres calculs pour les porphines de magnésium (fig. 2b), aquomagnésium (fig. 2b) et la base libre (fig. 2a) ont été réalisés en utilisant la méthode NCRD/2-CSC-OM (Maggiore, 1973) c'est-à-dire; négligence complète du recouvrement différentiel pour un champ "self-consistent" d'orbitales moléculaires. Cet-

te méthode semi-empirique considère seulement les électrons de valence de façon explicite. L'hamiltonien des électrons de valence s'écrit,

$$\hat{H}_{val} = \sum_{i=1}^m \left(-\frac{1}{2} \nabla_i^2 + V_i \right) + \sum_{i=1}^m \sum_{j>i}^m \frac{1}{r_{ij}} \quad (\text{I.B.10})$$

où V_i est l'énergie potentielle de l'électron de valence dans le champ des noyaux et des électrons des couches internes. Les OM de valence, ϕ^{val} , sont exprimées dans une base minimum d'OA de valence, f^{val} (I.B.2) qui sont des fonctions de Slater (II.A.34). Cette méthode est du type "champ self-consistent" et résout de façon itérative les équations de Hartree-Fock-Roothaan (HFR) (II.A.30) en utilisant l'hamiltonien (I.B.10). Lorsqu'on exprime les OM comme combinaisons linéaires d'OA, les intégrales moléculaires de Coulomb (II.A.16) et les intégrales moléculaires d'échange (II.A.17) qui surviennent lors de la résolution des équations de HFR deviennent des combinaisons linéaires d'intégrales de répulsion d'OA du type,

$$\iint f_r^*(1) f_s(1) \frac{1}{r_{12}} f_t^*(2) f_u(2) dv_1 dv_2 = (rs|tu) \quad (\text{I.B.11})$$

La méthode NCRD fait l'approximation de recouvrement différentiel suivante,

$$f_r(1) f_s(1) dv_1 = 0 \quad r \neq s \quad (\text{I.B.12})$$

pour toutes les paires d'OA dans les intégrales à deux électrons. Ainsi les intégrales non nulles seront de la forme,

$$\iint f_r^*(1) f_r(1) \frac{1}{r_{12}} f_t^*(2) f_t(2) dv_1 dv_2 \equiv (rr|tt) \quad (\text{I.B.13})$$

et il en découle,

$$(rs|tu) = \delta_{rs} \delta_{tu} (rr|tt) \quad (\text{I.B.14})$$

Donc toutes les intégrales à trois et quatre centres sont nulles. Les intégrales du type,

$$\int f_r^*(1) \left[-\frac{1}{2} \nabla_i^2 + V_i \right] f_s(1) dv_1 \quad (\text{I.B.15})$$

sont approximées à l'aide d'un paramètre empirique, pour deux atomes liés, tandis que les intégrales du type,

$$\int f_r^*(1) \left[-\frac{1}{2} \nabla_i^2 + V_i \right] f_r(1) dv_1 \quad (\text{I.B.16})$$

sont différentes pour différents atomes et sont calculées avec une certaine formule approximative. La version originale de la méthode NCRD est appelée NCRD/1; la version améliorée utilisant une paramétrisation différente est appelée NCRD/2. Les calculs de Maggiora par cette méthode concordent entre autres, pour ce qui est de l'ordre des deux OM occupées de plus haute énergie, avec les données expérimentales disponibles, phénomène que d'autres types de calculs n'ont pu obtenir. Les potentiels d'ioni-

sation calculés sont aussi en accord de façon raisonnable avec l'expérience. Un grand écart entre les deux OM occupées de plus haute énergie et l'OM occupée suivante a été obtenu.

Une troisième publication d'intérêt sur le sujet est celle de Spangler et collaborateurs (Spangler, 1975) qui ont utilisé la méthode des fragments moléculaires pour étudier la structure électronique de l'éthyle chlorophyllide-a (fig. 1), de la porphine comme base libre (fig. 2a), de la porphine de magnésium (fig. 2b) et de la chlorine de magnésium (fig. 3). La méthode des fragments moléculaires (Christoffersen, 1969) est une méthode ab initio qui consiste à diviser un système moléculaire en fragments plus petits qu'on peut alors traiter de façon plus exacte étant donné la simplicité accrue du problème. La base utilisée pour représenter la fonction d'onde du système en question consiste en un ensemble de fonctions gaussiennes sphériques dites flottantes (FGSF) signifiant que leur origine ne se situe pas nécessairement aux positions des noyaux composant le fragment. Une telle FGSF a la forme suivante,

$$G_i(1) = \left[\frac{2}{\pi \rho_i^2} \right]^{\frac{3}{4}} \exp \left[- \frac{(\vec{r} - \vec{R}_i)^2}{\rho_i^2} \right] \quad (\text{I.B.17})$$

où ρ_i est le rayon orbital et \vec{R}_i est la position de la FGSF par rapport à une origine arbitraire. L'énergie de chaque fragment est minimisée par rapport aux paramètres ρ_i et \vec{R}_i . Les positions des noyaux dans chacun des fragments sont celles que l'on retrouvera dans la molécule étudiée avec des atomes d'hydro-

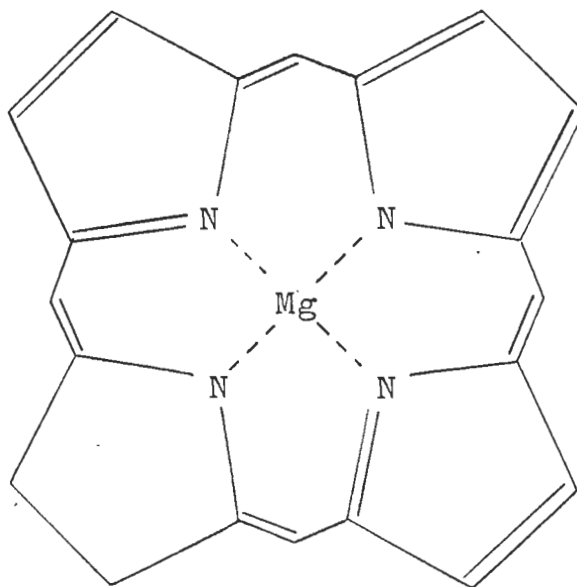


Figure 3. Molécule de chlorine de magnésium.

gène placés aux positions où il se formera les liaisons avec les autres fragments. Les fragments ainsi constitués ne correspondent pas nécessairement à des espèces moléculaires stables. Pour la molécule formée à partir des fragments, les OM s'écrivent comme,

$$\phi_i = \sum_{A=1}^P \sum_{k=1}^{N_A} C_{ki}^A G_k^A \quad (\text{I.B.18})$$

où les G_k^A sont les orbitales des fragments qu'on a déterminées au préalable et les C_{ki}^A sont les coefficients de l'expansion qu'on aura à déterminer. Les sommations sont sur les P fragments qui composent la molécule et sur les N_A FGSF formant le fragment A . Les changements dans la structure électronique apportés par la formation de liaisons entre les fragments sont reflétés par les coefficients linéaires qui sont déterminés par calcul variationnel. Les résultats obtenus par l'équipe de Spangler ont permis de comprendre un nombre de propriétés électroniques des quatre espèces moléculaires citées ci-dessus. Les relations entre la structure chimique et géométrique en fonction de la structure des OM, de la distribution de charge ainsi que des liaisons ont été étudiées.

Une dernière publication sur le sujet est celle de Petke et collaborateurs (Petke, 1978) qui ont réalisé des calculs ab-initio d'interaction de configuration (IC) sur l'état fondamental et les états singulet et triplet les plus bas pour la porphine (fig. 2a) et la porphine de magnésium (fig. 2b). La mé-

thode IC consiste à représenter la fonction d'onde moléculaire Ψ_k pour un état électronique k comme une combinaison linéaire de configuration Φ_l ,

$$\Psi_k = \sum_l C_{lk} \Phi_l \quad (\text{I.B.19})$$

où l'ensemble des configurations $\{\Phi_l\}$ est construit à partir de produits antisymétriques d'OM de spin appelés déterminants de Slater (II.A.10). Les coefficients C_{lk} sont obtenus par l'application du théorème variationnel (II.A.7) sur Ψ_k en considérant l'hamiltonien non-relativiste du système (II.A.2). Dans cette étude les OM de spin ont été obtenues de fonctions d'onde CSC ab initio de l'état fondamental pour la porphine libre et la porphine de magnésium. La base utilisée dans la procédure CSC pour exprimer les OM est un ensemble de FGSF comme pour la méthode des fragments moléculaires exposée ci-dessus. Petke et collaborateurs ont ainsi établi des propriétés spectroscopiques théoriques par la méthode IC pour la porphine et la porphine de magnésium. De plus une analyse de distribution de charge a été réalisée pour ces mêmes espèces.

Ainsi, comme on peut le constater par les travaux précédents, le problème de la structure électronique des composés de la famille de la chlorophylle a été attaqué pour les molécules entières. Les méthodes utilisées doivent donc être assez rigides pour limiter l'ampleur du problème qui dans un schème complètement ab initio serait, avec les moyens dont on dispo-

se actuellement, beaucoup trop difficile à résoudre.

I.C. Objectifs.

L'idée de considérer que le fragment $\text{Mg}^{2+}\text{N}_4\text{O}$ est d'abord pour étudier les effets de l'environnement immédiat du magnésium sur ce dernier. La dimension réduite du problème nous permet d'utiliser un schème ab initio.

On veut réaliser l'étude du fragment $\text{Mg}^{2+}\text{N}_4\text{O}$ en calculant sa fonction d'onde pour ensuite l'interpréter par l'analyse de distributions de charges. A titre de comparaisons, l'étude des fonctions d'onde pour les fragments MgN_4 et Mg^{2+}N_4 sera aussi réalisée. On va pouvoir ainsi déterminer le type d'interaction entre les différents atomes des fragments considérés.

Même si le cycle porphyrinique n'est pas considéré, la fonction d'onde du fragment $\text{Mg}^{2+}\text{N}_4\text{O}$ peut s'avérer intéressante. Spécifiquement, l'effet de l'interaction avec l'atome d'oxygène pourrait être d'un certain intérêt dans l'étude de dimères de chlorophylle.

CHAPITRE II

THEORIE

II.A. Formalisme général.

II.A.1. Equation de Schrödinger.

Le problème fondamental consiste à obtenir une solution approximée de l'équation de Schrödinger pour le mouvement des électrons dans le champ de noyaux fixes, c'est-à-dire dans l'approximation de Born-Oppenheimer,

$$\hat{H}_e \Psi_e = E_e \Psi_e \quad (\text{II.A.1})$$

où \hat{H}_e est l'opérateur hamiltonien électronique, Ψ_e est la fonction d'onde électronique et E_e est l'énergie électronique du système. L'hamiltonien non relativiste du système composé de N noyaux et de m électrons s'écrit,

$$\hat{H}_e = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^m \nabla_i^2 - \sum_{i=1}^m \sum_{\mu=1}^N \frac{Z_\mu e^2}{r_{i\mu}} + \sum_{i=1}^m \sum_{j>i}^m \frac{e^2}{r_{ij}} \quad (\text{II.A.2.a})$$

où \hbar est la constante de Planck divisée par 2π , m est la masse de l'électron au repos et e est la charge de l'électron. En unités atomiques aussi appelées "hartrees", qu'on adoptera par la suite, - c'est-à-dire qu'on attribue aux constantes \hbar , m et e la valeur numérique de 1 - cet hamiltonien s'écrit,

$$\hat{H}_e = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^m \nabla_i^2 - \sum_{i=1}^m \sum_{\mu=1}^N \frac{Z_\mu}{r_{i\mu}} + \sum_{i=1}^m \sum_{j>i}^m \frac{1}{r_{ij}} \quad (\text{II.A.2.b})$$

Le premier terme de droite est l'opérateur d'énergie cinétique des électrons où ∇_i^2 est l'opérateur différentiel laplacien associé aux coordonnées de l'électron i ; le second terme est l'opérateur d'énergie potentielle d'attraction entre les électrons et les noyaux de charge nucléaire Z_μ où $r_{i\mu}$ est la distance entre l'électron i et le noyau μ ; le dernier terme est l'opérateur d'énergie potentielle de répulsion des électrons où r_{ij} est la distance entre l'électron i et l'électron j . L'hamiltonien incluant la répulsion nucléaire est,

$$\hat{H} = \hat{H}_e + V_{NN} \quad (\text{II.A.3})$$

où le terme de répulsion nucléaire V_{NN} est donné par,

$$V_{NN} = \sum_{\mu}^N \sum_{\nu>\mu}^N \frac{Z_\mu Z_\nu}{R_{\mu\nu}} \quad (\text{II.A.4})$$

$R_{\mu\nu}$ étant la distance entre le noyau μ et le noyau ν . Puisque les distances entre les noyaux sont fixes, le terme V_{NN} est une constante et on a,

$$(\hat{H}_e + V_{NN}) \Psi_e = U \Psi_e \quad (\text{II.A.5})$$

avec,

$$U = E_e + V_{NN} \quad (\text{II.A.6})$$

qui est l'énergie totale du système.

Pour trouver une solution approximée on utilise le théorème variationnel qui dit qu'une solution approximative Ψ est telle que,

$$E_0 \leq \frac{\int \Psi^* \hat{H} \Psi d\tau}{\int \Psi^* \Psi d\tau} \quad (\text{II.A.7})$$

où Ψ est n'importe quelle fonction se comportant normalement et satisfaisant les conditions aux limites du problème, l'intégration se faisant sur tout l'espace fonctionnel. E_0 est l'énergie réelle du système de l'état fondamental.

On assume comme forme de solution à l'équation de Schrödinger une fonction du type,

$$\Psi = \phi_1(1) \phi_2(2) \dots \phi_{m-1}(m-1) \phi_m(m) \quad (\text{II.A.8})$$

où les $\phi_i(j)$ sont représentées par le produit d'une fonction spatiale et d'une fonction de spin, c'est-à-dire,

$$\phi_i(j) = \phi_i(x_j, y_j, z_j) \alpha(j) \quad (\text{II.A.9.a})$$

ou encore,

$$\phi_i(j) = \phi_i(x_j, y_j, z_j) \beta(j) \quad (\text{II.A.9.b})$$

On appelle les équations (II.A.9) orbitales de spin.

De plus, pour que l'équation (II.A.8), appelée produit de Hartree, soit en accord avec le principe de Pauli, ψ doit être antisymétrique par rapport aux changements des coordonnées spatiales et de spin de n'importe quelles paires d'électrons du système. La forme la plus générale de ψ , pour satisfaire cette condition, est un déterminant ou une combinaison linéaire de déterminants de dimensions $n \times n$ appelé déterminant de Slater,

$$D = (n!)^{-\frac{1}{2}} \begin{vmatrix} \phi_1(1) & \phi_2(1) & \dots & \phi_{n-1}(1) & \phi_n(1) \\ \phi_1(2) & \phi_2(2) & \dots & \phi_{n-1}(2) & \phi_n(2) \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ \phi_1(n-1) & \phi_2(n-1) & \dots & \phi_{n-1}(n-1) & \phi_n(n-1) \\ \phi_1(n) & \phi_2(n) & \dots & \phi_{n-1}(n) & \phi_n(n) \end{vmatrix} \quad (\text{II.A.10.a})$$

où $(n!)^{-\frac{1}{2}}$ est une constante de normalisation. On note aussi (II.A.10.a) de façon abrégée,

$$D = \begin{vmatrix} \phi_1 & \phi_2 & \dots & \phi_{n-1} & \phi_n \end{vmatrix} \quad (\text{II.A.10.b})$$

Souvent on assume en plus que les orbitales de spin sont par paires, c'est-à-dire que la même forme de fonction spatiale

est utilisée pour l'électron 1 et l'électron 2 par exemple, mais multipliant des fonctions de spins opposés,

$$\phi_1(1) = \phi_1(x_1, y_1, z_1) \alpha(1) \equiv \phi_1(1) \quad (\text{II.A.11.a})$$

$$\phi_2(2) = \phi_1(x_2, y_2, z_2) \beta(2) \equiv \bar{\phi}_1(2) \quad (\text{II.A.11.b})$$

Pour un système moléculaire les ϕ représentent des orbitales moléculaires de spin tandis que pour un atome les ϕ représentent des orbitales atomiques de spin. De ces considérations deux types de système moléculaire peuvent exister. Le premier est le type "closed-shell", c'est-à-dire un système dont toutes les orbitales appartenant à un groupe de même dégénérescence sont doublement occupées. Ceci donne lieu à un état singulet totalement symétrique. On peut représenter un tel système par un seul déterminant de Slater. Le second est le type "open-shell", c'est-à-dire un système dont il existe au moins une orbitale qui, appartenant à un groupe d'orbitales de même dégénérescence, n'est pas doublement occupée. Un tel système peut nécessiter plus d'un déterminant de Slater pour sa représentation.

II.A.2. Equations de Hartree-Fock.

On sait que pour l'atome d'hydrogène la fonction d'onde exacte est connue. Pour l'atome d'hélium et de lithium, des fonctions d'onde très précises ont été calculées en incluant les distances interélectroniques dans les fonctions variationnelles.

Pour des atomes de nombre atomique plus grand et pour des molécules, la meilleure approche pour trouver une bonne fonction d'onde approximative est d'utiliser la méthode de Hartree-Fock.

En représentant une fonction d'onde Ψ par un déterminant de Slater (II.A.10) et en utilisant le théorème variationnel (II.A.7) on peut obtenir les équations de Hartree-Fock (voir Blinder, 1965 par exemple) pour un système du type "closed-shell".

L'énergie Hartree-Fock du système est donnée par,

$$\begin{aligned} E_{\text{HF}} &= \frac{\int \Psi^* (H_{\text{é}} + V_{\text{NN}}) \Psi d\tau}{\int \Psi^* \Psi d\tau} \\ &= \int \Psi^* (\hat{H}_{\text{é}} + V_{\text{NN}}) \Psi d\tau \end{aligned} \quad (\text{II.A.11})$$

, car Ψ est normalisé. Aussi puisque Ψ n'inclut pas les coordonnées nucléaires alors,

$$\int \Psi^* V_{\text{NN}} \Psi d\tau = V_{\text{NN}} \int \Psi^* \Psi d\tau = V_{\text{NN}} \quad (\text{II.A.12})$$

et l'équation (II.A.11) devient,

$$E_{\text{HF}} = \int \Psi^* H_{\text{é}} \Psi d\tau + V_{\text{NN}} \quad (\text{II.A.13})$$

où $H_{\text{é}}$ est l'hamiltonien (II.A.2.b). En utilisant la forme explicite de Ψ (II.A.10.a) dans (II.A.13) et en considérant les orbitales orthonormales, c'est-à-dire,

$$\int \phi_i^* \phi_j dv = \delta_{ij} \quad (\text{II.A.14.a})$$

on trouve que E_{HF} , pour un système du type "closed-shell", est donné par,

$$E_{\text{HF}} = 2 \sum_{i=1}^{\frac{m}{2}} H_i + \sum_{i=1}^{\frac{m}{2}} \sum_{j=1}^{\frac{m}{2}} (2 J_{ij} - K_{ij}) + V_{\text{NN}} \quad (\text{II.A.14.b})$$

où H_i représente les intégrales à un électron,

$$H_i = \int \phi_i^*(1) \left[-\frac{1}{2} \nabla_i^2 - \sum_{\mu=1}^N \frac{Z_{\mu}}{r_{1\mu}} \right] \phi_i(1) dv_1 \quad (\text{II.A.15})$$

l'intégration se faisant sur les variables d'espace, x_1, y_1, z_1 , d'un électron qu'on indexe 1.

J_{ij} sont des intégrales à deux électrons appelées intégrales de Coulomb,

$$J_{ij} = \int \phi_i^*(1) \phi_j^*(2) \frac{1}{r_{12}} \phi_i(1) \phi_j(2) dv_1 dv_2 \quad (\text{II.A.16})$$

et K_{ij} sont aussi des intégrales à deux électrons appelées intégrales d'échange,

$$K_{ij} = \int \phi_i^*(1) \phi_j^*(2) \frac{1}{r_{12}} \phi_j(1) \phi_i(2) dv_1 dv_2 \quad (\text{II.A.17})$$

En minimisant E_{HF} (II.A.14.b) par rapport aux ϕ on obtient m équations couplées qui sont les équations de Hartree-Fock,

$$\hat{F}(1) \phi_i(1) = \epsilon_i \phi_i(1) \quad (\text{II.A.18})$$

où ϵ_i est l'énergie de l'orbitale i et \hat{F} est l'opérateur de

(Hartree-)Fock,

$$\hat{F}(1) = -\frac{1}{2} \nabla_1^2 - \sum_{\mu=1}^N \frac{Z_{\mu}}{r_{1\mu}} + \sum_{j=1}^{23} \left[2 \hat{J}_j(1) - \hat{K}_j(1) \right] \quad (\text{II.A.19})$$

où l'opérateur de Coulomb \hat{J}_j et l'opérateur d'échange \hat{K}_j sont définis par,

$$\hat{J}_j(1) \phi_i(1) = \phi_i(1) \int \phi_j^*(2) \phi_j(2) \frac{1}{r_{12}} dv_2 \quad (\text{II.A.20})$$

$$\hat{K}_j(1) \phi_i(1) = \phi_j(1) \int \phi_j^*(2) \phi_i(2) \frac{1}{r_{12}} dv_2 \quad (\text{II.A.21})$$

Le premier terme de droite de (II.A.19) est l'opérateur d'énergie cinétique d'un électron; le deuxième terme est l'opérateur d'énergie potentielle d'attraction entre un électron et les noyaux. Ces deux termes forment ce que l'on appelle l'hamiltonien monoélectronique du centre du système ignorant toutes interactions avec les autres électrons,

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} \nabla_1^2 - \sum_{\mu=1}^N \frac{Z_{\mu}}{r_{1\mu}} \quad (\text{II.A.22})$$

L'opérateur de Coulomb \hat{J}_j représente l'énergie potentielle d'interaction entre l'électron 1 et un autre électron de densité électronique $|\phi_j(2)|^2$. Le facteur de 2 devant \hat{J}_j dans (II.A.19) survient du fait qu'il y a deux électrons par orbitale spatiale. L'opérateur d'échange \hat{K}_j n'a pas d'interprétation physique simple mais survient du fait que la fonction d'onde du

système est antisymétrique par rapport à l'échange de coordonnées électroniques.

Considérant (II.A.19), (II.A.20) et (II.A.21) on voit que les équations (II.A.18) sont du type intégrodifférentielles couplées. Puisque l'opérateur \hat{F} dépend de ses fonctions propres, les équations de Hartree-Fock doivent être résolues de façon itérative jusqu'à ce qu'elles soient "self-consistantes".

L'énergie d'une orbitale est donnée par,

$$\epsilon_i = \int \phi_i^*(1) \hat{F}(1) \phi_i(1) dv_1. \quad (\text{II.A.23})$$

Utilisant (II.A.19) et (II.A.22) on a que,

$$\begin{aligned} \epsilon_i &= \int \phi_i^*(1) \hat{H} \phi_i(1) dv_1 \\ &\quad + \sum_{j=1}^{\frac{n}{2}} \left[2 \int \phi_i^*(1) \hat{J}_j(1) \phi_i(1) dv_1 - \int \phi_i^*(1) \hat{K}_j(1) \phi_i(1) dv_1 \right] \\ &= H_i + \sum_{j=1}^{\frac{n}{2}} [2 J_{ij} - K_{ij}] \end{aligned} \quad (\text{II.A.24})$$

En sommant (II.A.24) sur toutes les orbitales occupées on a,

$$2 \sum_{i=1}^{\frac{n}{2}} \epsilon_i = 2 \sum_{i=1}^{\frac{n}{2}} H_i + 2 \sum_{i=1}^{\frac{n}{2}} \sum_{j=1}^{\frac{n}{2}} [2 J_{ij} - K_{ij}] \quad (\text{II.A.25})$$

d'où,

$$2 \sum_{i=1}^{\frac{n}{2}} H_i = 2 \sum_{i=1}^{\frac{n}{2}} \epsilon_i - 2 \sum_{i=1}^{\frac{n}{2}} \sum_{j=1}^{\frac{n}{2}} [2 J_{ij} - K_{ij}] \quad (\text{II.A.26})$$

Substituant (II.A.26) dans l'expression pour E_{HF} (II.A.14.b) on obtient,

$$E_{\text{HF}} = 2 \sum_{i=1}^{\frac{n}{2}} \epsilon_i - \sum_{i=1}^{\frac{n}{2}} \sum_{j=1}^{\frac{n}{2}} [2 J_{ij} - K_{ij}] + V_{\text{NN}} \quad (\text{II.C.27})$$

L'équation (II.A.27) nous montre ainsi que l'énergie totale du système n'est pas simplement la somme des énergies des orbitales occupées et de l'énergie potentielle de répulsion nucléaire mais qu'un terme supplémentaire, qui est la double sommation, doit être soustrait.

Pour calculer une fonction d'onde par la méthode qu'on vient de décrire, on exprime chaque orbitale moléculaire comme combinaison linéaire d'orbitales atomiques. C'est ce qu'on appelle l'approximation CLOA (Roothaan, 1951),

$$\phi_i = \sum_k c_{ki} \chi_k \quad (\text{II.A.28.a})$$

où les χ_k sont des OA normalisées, c'est-à-dire,

$$\int \chi_k^* \chi_k dv = 1 \quad (\text{II.A.28.b})$$

En substituant cette expression dans (II.A.18) on obtient,

$$\sum_k c_{ki} \hat{F} \chi_k = \epsilon_i \sum_k c_{ki} \chi_k \quad (\text{II.A.29})$$

et en multipliant (II.A.29) de chaque côté par χ_j^* et en inté-

grant on a que,

$$\sum_k C_{ki} (F_{jk} - \epsilon_i S_{jk}) = 0 \quad j=1,2,\dots \quad (\text{II.A.30})$$

où,

$$F_{jk} = \int \chi_j^* \hat{F} \chi_k d\tau \quad (\text{II.A.31})$$

$$S_{jk} = \int \chi_j \chi_k d\tau \quad (\text{II.A.32})$$

Les équations (II.A.30) forment un système d'équations homogènes dont les inconnus sont les C_{ki} . Pour une solution non-triviale on doit avoir,

$$\det (F_{jk} - \epsilon_i S_{jk}) = 0 \quad (\text{II.A.33})$$

L'équation (II.A.33) est une équation séculaire nous permettant d'obtenir les énergies ϵ_i des orbitales. Les équations (II.A.30) appelées équations de Hartree-Fock-Roothaan doivent être résolues par un procédé itératif puisque les intégrales F_{jk} (II.a.31) dépendent des orbitales ϕ_i , par le biais de l'opérateur \hat{F} (II.A.19) (II.A.20) (II.A.21), et que ces ϕ_i dépendent des coefficients C_{ki} (II.A.28).

On donne en annexe A quelques commentaires sur les systèmes du type "open-shell".

II.A.3. Fonctions de base.

Deux types de base sont utilisés principalement pour représenter explicitement les orbitales atomiques χ_j (II.A.28); les fonctions de Slater (Slater, 1930) et les fonctions gaussiennes (Boys, 1950). Chacune possède ses avantages et ses désavantages.

En coordonnées sphériques, une fonction de Slater (FS) a la forme suivante,

$$f_{FS} = N_{FS} r^{n-1} \exp(-\zeta r) Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (\text{II.A.34})$$

où N_{FS} est une constante de normalisation, r est la distance du point (x, y, z) à l'origine de la fonction, n , l et m sont les nombres quantiques atomiques caractérisant la fonction, ζ est l'exposant orbital et $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ est l'harmonique sphérique correspondante dont on utilise la forme réelle.

En coordonnées sphériques, une fonction gaussienne (FG) a la forme suivante,

$$f_{FG} = N_{FG} r^{n-1} \exp(-\alpha r^2) Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (\text{II.A.35})$$

où N_{FG} est une constante de normalisation, r est la distance du point (x, y, z) à l'origine de la fonction, n , l et m sont les nombres quantiques atomiques caractérisant la fonction, α est l'exposant orbital et $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ est l'harmonique sphérique correspondante dont on utilise la forme réelle.

Pour des calculs sur des systèmes moléculaires, le système de coordonnées cartésiennes est souvent utilisé. Dans ce cas une FG a la forme suivante,

$$f_{FG_c} = N_{FG_c} x^l y^m z^n \exp(-\alpha r^2) \quad (II.A.36)$$

où N_{FG_c} est une constante de normalisation, l , m et n sont des entiers positifs et α est l'exposant orbital. Il est à noter que les entiers n , l et m de (II.A.35) sont différents des entiers l , m et n de (II.A.36). De façon explicite ces derniers sont définis par: $l+m+n=0$ implique une FG du type s, donc ayant la forme, $\exp(-\alpha r^2)$; $l+m+n=1$ implique une FG du type p, donc ayant la forme, $x \exp(-\alpha r^2)$ ou $y \exp(-\alpha r^2)$ ou $z \exp(-\alpha r^2)$. On peut noter cela de la façon suivante, $(x,y,z) \exp(-\alpha r^2)$; $l+m+n=2$ implique une FG du type d, donc ayant la forme, $(x^2, y^2, z^2, xy, xz, yz) \exp(-\alpha r^2)$; $l+m+n=3$ implique une FG du type f, donc ayant la forme $(x^3, y^3, z^3, x^2y, x^2z, y^2x, y^2z, z^2x, z^2y, xyz) \exp(-\alpha r^2)$.

La principale différence entre une FS et une FG est que la première possède une dérivée non nulle à $r=0$ (fig.4). Et cette propriété de décroissance est essentielle pour la description précise de fonctions d'onde atomiques ou moléculaires près des noyaux. C'est pourquoi il faut utiliser une combinaison linéaire de plusieurs FG pour avoir une bonne représentation d'une OA. Ainsi un calcul qui utilise la méthode CL-FG-CSC-OM implique l'évaluation d'un plus grand nombre d'intégrales que le calcul correspondant par CL-FS-CSC-OM. Cependant

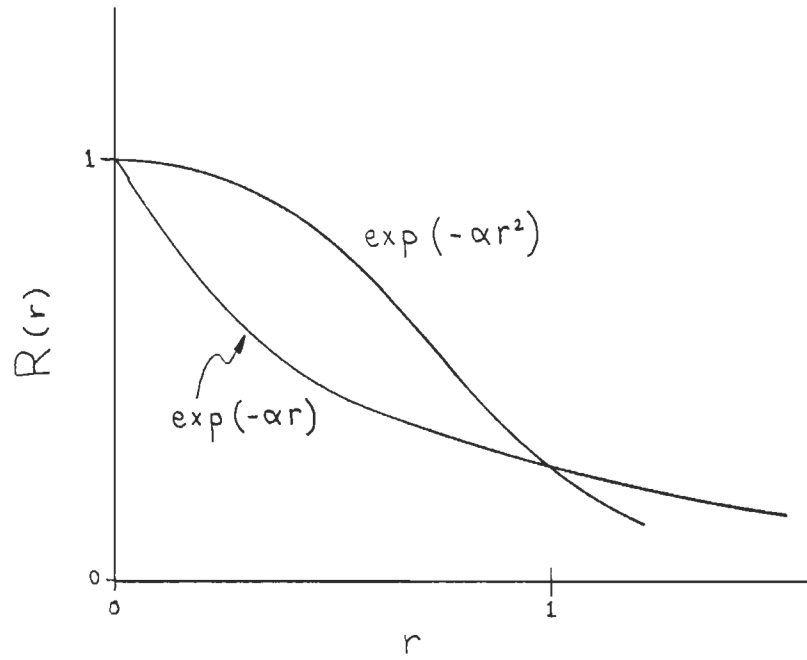


Figure 4. Dépendance radiale comparée de FS et FG.

l'évaluation d'intégrales impliquant des FG est beaucoup plus simple que l'évaluation d'intégrales impliquant des FS. Ceci est expliqué du fait que le produit de deux FG situées sur des centres différents est égal à une troisième FG située sur un autre centre. Donc, toutes les intégrales de répulsion à deux électrons à trois et quatre centres se réduisent à des intégrales à deux centres.

Tous les calculs étant fait par ordinateur, le temps d'évaluation peut être un facteur déterminant si l'on désire étudier une molécule avec un certain nombre de centres. Par exemple le nombre d'intégrales de répulsion est proportionnel à B^4 où B est le nombre de fonctions de base. Donc il est possible de choisir une base dépendamment du type de problème que l'on veut traiter. Pour des calculs atomiques les FS semblent le meilleur choix puisque l'évaluation d'intégrales à un centre n'est pas plus difficile pour les FS que pour les FG. Pour des molécules linéaires plusieurs calculs CSC avec des FS ont été réalisés puisque des méthodes numériques particulières peuvent alors être utilisées. Et enfin pour des molécules non linéaires, les FG sont préférées pour des calculs CSC puisque le taux d'évaluation des intégrales est plus rapide malgré le plus grand nombre de ces intégrales.

En plus de choisir un type de fonction de base, il existe plusieurs façon d'utiliser ces fonctions. Par exemple l'emploi d'une seule FS par OA constitue une base minimum. Si on utilise deux FS, avec des exposants différents, par OA cela consti-

tue une base double-zéta. Cette seconde représentation est plus précise que la première de façon notable. L'utilisation d'une infinité de FS, c'est-à-dire une base complète, représenterait de façon précise chaque OA, mais pour des raisons évidentes il est impossible de réaliser cela de façon analytique bien que numériquement possible. L'idée dans les calculs CLOA est d'utiliser une base finie qui saura représenter le mieux possible les OA du problème considéré. On peut utiliser aussi le schème de fonctions de valence divisées (VD) qui consiste à représenter les OA de valence par deux FS et les autres OA des couches internes par une seule FS. Pour mieux représenter les distorsion des OA dans la formation de molécules on peut ajouter aussi des fonctions de polarisation (FP). Pour permettre cette polarisation, ces FP doivent avoir leur nombre quantique l plus grand que le l maximum de l'atome libre correspondant. Pour faire allusion aux FG, il existe un type de base appelée FS-NG qui est en fait une base minimum où chaque FS est approximée comme une combinaison linéaire de N fonctions gaussiennes. Les coefficients et les exposants orbitaux des FG dans les combinaisons linéaires sont déterminés par la méthode du moindre carré. Le schème le plus habituel est celui où $N=3$. On donne en annexe B les notations utilisées pour dénoter ces différentes bases de façon explicite.

On a défini ici certaines bases par rapport aux FS mais la pratique actuelle en chimie quantique est d'utiliser ces termes indifféremment du type de fonction de base considérée.

II.B. Système de programmes POLYATOM.

II.B.1. Description générale de POLYATOM.

Le système POLYATOM version II (Neumann, 1971) est un ensemble de programmes pour calculer la fonction d'onde électronique déterminantale de molécules à partir d'une base de FG. Différentes propriétés peuvent aussi être calculées. Tous les calculs sont du type ab initio incluant tous les électrons et calculant toutes les intégrales. POLYATOM a demandé vingt-cinq années de travail impliquant plus de vingt personnes. Le système a été conçu de façon à être modifié assez facilement par l'utilisateur.

Tout le système est codé en langage FORTRAN IV à l'exception de deux sous-routines; PACK et UNPACK, qui sont codées en langage machine. Ces sous-routines ont du être réécrites pour être compatible avec la version COMPASS 3.6 de NOS 2.2 602 de CDC. Elles sont données en annexe C.

Le système de programmes POLYATOM est orienté vers la méthode CSC-OM mais sa flexibilité permet de l'utiliser dans d'autres modes. PA20A et PA20B sont deux programmes qui créent des listes d'étiquettes pour les intégrales à un et deux électrons respectivement. PA30A et PA30B sont les programmes correspondant pour calculer ces intégrales. PA40 effectue un calcul "closed-shell" CSC. PA41 effectue un calcul "open-shell" CSC. PA59 est un programme pour réaliser une analyse de population de Mulliken. Et PA60 calcule jusqu'à 18 propriétés monoélectroniques pour la fonction d'onde considérée.

La limite pour le nombre de fonctions de base est de 1024 pour le système CDC utilisant des mots de soixante bits. Cependant, un nombre illimité de centres avec un nombre illimité de propriétés de symétrie peuvent être considérés.

II.B.2. Description des programmes PA20A et PA20B.

Le but des programmes PA20A et PA20B est de générer des listes d'étiquettes pour les intégrales à un et deux électrons respectivement, tout en éliminant celles qui sont identiquement zéro et en réduisant au minimum le nombre d'intégrales qui doivent être évaluées indépendamment. Le fichier de données est constitué principalement d'une matrice de transformation des fonctions monoélectroniques utilisées. Chaque colonne correspond à une transformation du groupe ponctuel auquel appartient la molécule. L'opération d'identité peut ne pas être considérée. Et chaque rangée correspond à une FG. On forme cette matrice de la façon suivante: la fonction $\pm k$ obtenue en appliquant la j ième opération sur la i ième fonction formera l'élément (i,j) . Si la transformation génère une fonction autre que celles considérées, alors $(i,j)=0$. Cela peut être une combinaison linéaire par exemple.

Les formats explicites pour les fichiers de données correspondant à PA20A et PA20B sont présentés en annexe D.

A partir de ces données les programmes créent des fichiers contenant les listes des étiquettes des intégrales de recouvrement (G), d'énergie cinétique (T), d'attraction nucléaire (V) et de répulsion électronique (M). Les listes sont constituées

de façon que toutes les intégrales non nulles soient représentées et que les intégrales liées par le biais des transformations de symétrie sont consécutives.

II.B.3. Description des programmes PA30A et PA30B.

Le but des programmes PA30A et PA30B est d'évaluer les intégrales à un et deux électrons spécifiées par les listes générées par PA20A et PA20B respectivement. Le fichier de données est principalement constitué des paramètres caractérisant chaque fonction de base. Ces fonctions de bases χ_p , doivent être de la forme,

$$\chi_p(\vec{r}_A) = N_p f_p(x_A, y_A, z_A) \sum_u C_{pu} N_u \exp(-\alpha_u r_A^2) \quad (\text{II.B.1})$$

, \vec{r}_A étant centré par rapport au point (A_x, A_y, A_z) . Le vecteur \vec{A} étant centré à son tour sur une origine arbitraire. La fonction (II.B.1) se nomme gaussienne contractée où N_p est sa constante de normalisation.

On définit maintenant la fonction $\eta(\vec{r}_A)$ comme,

$$\eta(\vec{r}_A) = N_u f_u(x_A, y_A, z_A) \exp(-\alpha_u r_A^2) \quad (\text{II.B.2})$$

qu'on appelle gaussienne primitive où N_u est sa constante de normalisation.

Les coefficients C_{pu} dans (II.B.1) sont ceux des primitives normalisées, $\eta_u \cdot f_p(x_A, y_A, z_A)$ est le préfacteur et est le même pour chaque primitive. De plus il doit être de la forme,

$$f(x, y, z) = x^l y^m z^n \quad (\text{II.B.3})$$

où,

$$l + m + n \leq 3 \quad (\text{II.B.4})$$

Les opérateurs \hat{G} , \hat{T} , \hat{V} et \hat{M} sont les opérateurs de recouvrement, d'énergie cinétique, d'attraction nucléaire et de répulsion électronique respectivement. Leur forme explicite est la suivante,

$$\hat{G} = 1 \quad (\text{II.B.5.a})$$

$$\hat{T} = -\frac{1}{2} \nabla^2 \quad (\text{II.B.5.b})$$

$$\hat{V} = \sum_{\mu=1}^N \frac{Z_{\mu}}{r_{1\mu}} \quad (\text{II.B.5.c})$$

$$\hat{M} = \frac{1}{r_{12}} \quad (\text{II.B.5.d})$$

Les intégrales à calculer sont de la forme,

$$\int \chi_i(1) \hat{G} \chi_j(1) dv_1 \quad (\text{II.B.6.a})$$

$$\int \chi_i(1) \hat{T} \chi_j(1) dv_1 \quad (\text{II.B.6.b})$$

$$\int \chi_i(1) \hat{V} \chi_j(1) dv_1 \quad (\text{II.B.6.c})$$

, par PA30A et,

$$\int \chi_i(1) \chi_j(2) \hat{M} \chi_k(1) \chi_l(2) dv_1 dv_2 \quad (\text{II.B.6.d})$$

, par PA30B.

L'étape essentielle pour la réduction des intégrales multicentres est l'application du théorème suivant: Le produit de deux gaussiennes sur des centres A et B est égal à une autre gaussienne centrée sur un point du segment AB, soit,

$$\exp \left[-\alpha (r_A^2 + r_B^2) \right] = \text{constante} \exp(-\alpha' r_E^2) \quad (\text{II.B.7})$$

Les méthodes utilisées pour l'évaluation des intégrales sont des variantes de celles suggérées par Boys (Boys, 1950). Les formules utilisées sont basées sur celles développées par Clementi et Davis (Clementi, 1966) et par Taketa, Huzinaga et

O-Ohata (Taketa, 1966).

Les formats explicites pour les fichiers de données correspondant à PA30A et PA30B sont présentés en annexe E.

II.B.4. Description du programme PA40.

Le but du programme PA40 est de calculer les OM, leur énergie et l'énergie totale d'une fonction d'onde CLOA-CSC-OM représentée par un seul déterminant de Slater. Le fichier de données est principalement constitué d'un ensemble de fonctions de symétrie et de l'occupation des OM spécifiant l'état électronique que l'on veut étudier. Un ruban ou un disque magnétique contenant les intégrales calculées par PA30A et PA30B doit aussi être fourni.

Le problème à résoudre par PA40 est le même que celui développé à la section (II.A.) c'est-à-dire solutionner les équations de Hartree-Fock-Roothaan (II.A.30). On utilise ici la notation propre au programme PA40.

Les OM sont écrites comme combinaisons linéaires de fonctions de base η_p , ou encore de fonctions contractées χ_p ,

$$\phi_i = \sum_p Y_{ip} \eta_p \quad (\text{II.B.8})$$

Sous forme matricielle, les équations de Hartree-Fock-Roothaan s'écrivent,

$$F Y^{\dagger} = G Y^{\dagger} E \quad (\text{II.B.9})$$

où,

$$\overline{F} = \overline{H} + 2 \overline{J} - \overline{K} \quad (\text{II.B.10})$$

et,

$$\overline{H} = \overline{T} + \overline{V} \quad (\text{II.B.11})$$

\overline{G} étant la matrice des intégrales de recouvrement. Les différents éléments de ces matrices sont définis de la façon suivante,

$$G_{pq} = \int \eta_p^{(1)} \eta_q^{(1)} dv_1 \quad (\text{II.B.12})$$

$$T_{pq} = \int \eta_p^{(1)} \left[-\frac{1}{2} \nabla^2 \right] \eta_q^{(1)} dv_1 \quad (\text{II.B.13})$$

$$V_{pq} = \int \eta_p^{(1)} \left[-\sum_{\mu=1}^N \frac{Z_{\mu}}{r_{1\mu}} \right] \eta_q^{(1)} dv_1 \quad (\text{II.B.14})$$

$$J_{pq} = \sum_r \sum_s D_{rs} \int \eta_p^{(1)} \eta_q^{(2)} \left[\frac{1}{r_{12}} \right] \eta_r^{(1)} \eta_s^{(2)} dv_1 dv_2 \quad (\text{II.B.15})$$

$$K_{pq} = \sum_r \sum_s D_{rs} \int \eta_p^{(1)} \eta_r^{(2)} \left[\frac{1}{r_{12}} \right] \eta_q^{(1)} \eta_s^{(2)} dv_1 dv_2 \quad (\text{II.B.16})$$

où \overline{D} est la matrice densité monoélectronique définie comme,

$$D_{rs} = 2 \sum_i f_i Y_{ir} Y_{is} \quad (\text{II.B.17})$$

où f_i est l'occupation fractionnaire de la i ième OM.

L'équation (II.B.9) doit être résolue indirectement en formant un ensemble de fonctions de symétrie $\{\sigma\}$ orthonormales à partir de l'ensemble $\{\eta\}$,

$$\{\sigma\} = S \{\eta\} \quad (\text{II.B.18})$$

où,

$$S G S^\dagger = 1 \quad (\text{II.B.19})$$

On utilise cette matrice S pour transformer (II.B.9) soit,

$$S F S^\dagger (S^\dagger)^{-1} Y^\dagger = S G S^\dagger (S^\dagger)^{-1} Y^\dagger E \quad (\text{II.B.20})$$

Posons,

$$F' = S F S^\dagger \quad (\text{II.B.21})$$

et,

$$W = (S^\dagger)^{-1} Y^\dagger \Rightarrow Y^\dagger = S^\dagger W \quad (\text{II.B.22})$$

alors le problème revient à résoudre,

$$F' W = W E \quad (\text{II.B.23})$$

La matrice F' étant par blocs suivant les types de symétrie puisque la transformation S est ordonnée de façon que les orbitales de symétrie appartenant à la même représentation irréductible soient placées sur des rangées adjacentes.

Puisque F est dépendante des solutions de (II.B.9) par le biais des équations (II.B.15), (II.B.16) et (II.B.17), la matrice des coefficients des OM, Y , doit être trouvée par méthode itérative.

Le programme forme la matrice S à partir d'une matrice C comprenant un ensemble d'orbitales de symétrie étant groupées par représentations irréductibles. Cette matrice C doit être incluse dans le fichier de données. On a donc,

$$C G C^\dagger = G' \quad (\text{II.B.24})$$

où G' est une matrice diagonale par blocs. On diagonalise maintenant G' ,

$$U^\dagger G' U = g \quad (\text{II.B.25})$$

En multipliant de chaque côté par $g^{-\frac{1}{2}}$,

$$g^{-\frac{1}{2}} U G' U g^{-\frac{1}{2}} = 1 \quad (\text{II.B.26})$$

et considérant (II.B.24) et (II.B.19) on a que,

$$S = g^{-\frac{1}{2}} U C \quad (\text{II.B.27})$$

On expose maintenant la méthode pour générer les fonctions de symétrie de départ, ce qui est en fait la matrice C . Soit l'hamiltonien d'une molécule totalement symétrique par rapport à un groupe ponctuel de symétrie g composé des opérations R_m avec C représentations irréductibles Γ_i de dimension l_i . Dénotons par $\chi_i(R_m)$ le caractère de l'opération R_m dans Γ_i . On associe avec chaque représentation irréductible un opérateur de projection P_i défini comme,

$$P_i = \frac{l_i}{g} \sum_{m=1}^g \chi_i(R_m)^* R_m \quad i=1 \dots C \quad (\text{II.B.28})$$

L'application d'un tel projecteur sur une fonction d'onde arbitraire donne une nouvelle fonction qui appartient à la représentation Γ_i et possède les propriétés de symétrie voulues soit,

$$\sigma_{\theta_i} = P_i \xi \quad (\text{II.B.29})$$

où ξ est une fonction de base et σ_{ξ} est la fonction de symétrie résultante.

L'algorithme utilisé par PA40 pour déterminer les solutions "self-consistantes" de (II.B.9) est le suivant.

A.1. Forme S par le biais de (II.B.24) à (II.B.27).

A.2. Forme $H = T + V$ par le biais de (II.B.11), (II.B.13) et (II.B.14).

A.3.a. Symétrise par bloc H . $H' = S H S$.

A.3.b. Diagonalise H' par bloc. $H W_0 = W_0 E$

A.3.c. Forme $Y_0^\dagger = S W$. A ce point $Y = Y_0$.

B.1. Forme D à partir de Y par le biais de (II.B.17).

B.2. Forme $F = T$ et la valeur moyenne de l'opérateur d'énergie cinétique $\langle T \rangle = \text{trace} \{ D T \}$.

B.3. Forme $F = H$ et la valeur moyenne de l'opérateur d'attraction nucléaire $\langle V \rangle = \text{trace} \{ D V \}$.

B.4. Forme $F = H + 2J - K$ et la valeur moyenne de l'opérateur de Hartree-Fock-Roothaan $\langle F \rangle = \text{trace} \{ D F \}$.

B.5. Forme la valeur moyenne de l'énergie électronique $\langle E \rangle = \frac{1}{2} \{ \langle T \rangle + \langle V \rangle + \langle F \rangle \}$ et $\frac{\langle E \rangle - \langle T \rangle}{\langle T \rangle}$.

B.6. Compare l'énergie électronique de B.5 avec la valeur précédente. Si leur différence est plus petite qu'une certaine valeur alors vas à C.1.

B.7.a. Symétrise par bloc F en utilisant S si c'est la première fois que cette étape est réalisée. Sinon symétrise par bloc F en utilisant la dernière matrice Y . On a alors $S = Y$. $F' = S F S^\dagger$

B.7.b. Diagonalise F par bloc. $F' W_1 = W_1 E_1$

B.7.c. Transforme W_1 . $Y_1^+ = S^+ W_1$

B.8. Pose $Y = Y_1$ et va à B.1 .

C.1. Il y a "self-consistance" pour l'énergie électronique. Imprime les résultats des coefficients des OM, de leur énergie, etc.

Les formats explicites du fichier de données correspondant à PA40 sont présentés en annexe F.

II.B.5. Description du programme PA41.

Le but du programme PA41 est le même que PA40 mais pour des états du type "open-shell". La méthode employée est celle développée par C.C.J. Roothaan (Roothaan, 1960). Un seul hamiltonien est utilisé pour les parties "closed-shell" et "open-shell".

Les formats explicites du fichier de données correspondant à PA41 sont présentés en annexe G.

II.B.6. Description du programme PA59.

Le but du programme PA59 est de réaliser une analyse de population de Mulliken et une analyse de population de recouvrement.

Soit une OM, ϕ_i , exprimée comme une combinaison linéaire de fonctions de base, χ_j ,

$$\phi_i = c_1 \chi_1 + c_2 \chi_2 + \dots + c_m \chi_m \quad (\text{II.B.30})$$

La densité de probabilité associée à un électron dans cette OM est,

$$|\phi_i|^2 = c_1^2 \chi_1^2 + c_2^2 \chi_2^2 + \dots + 2c_1c_2 \chi_1\chi_2 + \dots \quad (\text{II.B.31})$$

Intégrant (II.B.31) sur tout l'espace et utilisant le fait que ϕ_i et que les χ_j sont normalisées, on a que,

$$1 = c_1^2 + c_2^2 + \dots + 2c_1c_2 G_{12} + 2c_1c_3 G_{13} + \dots \quad (\text{II.B.32})$$

où, ici, les G sont des intégrales de recouvrement du type,

$$G_{ij} = \int \chi_i(1) \chi_j(1) dv_1 \quad (\text{II.B.33})$$

Deux genres de contributions existent donc. On dit qu'un électron dans l'OM ϕ_i contribue c_1^2 à la population atomique nette (PAN) de χ_1 , c_2^2 à la PAN de χ_2 , etc., et contribue $2c_1c_2 G_{12}$ à la population de recouvrement (PR) entre χ_1 et χ_2 , $2c_1c_3 G_{13}$ à la PR entre χ_1 et χ_3 , etc. Sommant les contributions sur tous les électrons on obtient la PAN pour chaque χ et la PR pour chaque paire de χ .

Si on somme les contributions des PR pour toutes les paires de χ dans une OM donnée, alors on obtient la PR totale d'une OM. Si cette PR est substantiellement positive l'OM est dite liante; si elle est substantiellement négative l'OM

est dite antiliante; si elle est nulle ou près de zéro l'OM est dite non liante.

Pour attribuer des populations atomiques brutes (PAB) à chaque χ , on divise la PR $2c_i c_j G_{ij}$ également entre χ_i et χ_j . La contribution d'un électron dans l'OM ϕ_i à la PAB de χ_1 est donnée par,

$$c_1^2 + c_1 c_2 G_{12} + c_1 c_3 G_{13} + \dots + c_1 c_m G_{1m} \quad (\text{II.B.34})$$

Si on additionne ces PAB des χ sur chaque centre, alors on obtient la population atomique totale (PAT) sur ce centre.

Les formats explicites du fichier de données correspondant à PA59 sont présentés en annexe H.

II.B.7. Description du programme PA60.

Le but du programme PA60 est de calculer les valeurs moyennes de différents opérateurs monoélectroniques avec l'aide des fonctions d'onde générées par PA40. Voici quelques propriétés avec leur numéro de référence,

1. Potentiel: $(x^2+y^2+z^2)^{-\frac{1}{2}}=1/r$
3. Champ électrique: $x/r^3, y/r^3, z/r^3$
4. Gradient du champ électrique: $(3x^2-r^2)/r^5, (3y^2-r^2)/r^5, (3z^2-r^2)/r^5, 3xy/r^5, 3xz/r^5, 3yz/r^5$
5. Moment dipolaire: x, y, z
6. Moment quadrupolaire: $\frac{1}{2}(3x^2-r^2), \frac{1}{2}(3y^2-r^2), \frac{1}{2}(3z^2-r^2), (3/2)xy, (3/2)xz, (3/2)yz$

La valeur d'une propriété observable d'un système quantique est définie comme la valeur moyenne de l'opérateur représentant cette propriété par rapport à la fonction d'onde de l'état considéré.

Soit \mathcal{F} l'opérateur représentant la propriété F . Alors la valeur moyenne $\langle F \rangle$ est donnée par,

$$\langle F \rangle = \frac{\int \Psi^* \mathcal{F} \Psi d\tau}{\int \Psi^* \Psi d\tau} \quad (\text{II.B.35})$$

Soit le moment dipolaire électrique,

$$\vec{\mu} = \sum_{\mu=1}^N Z_{\mu} \vec{R}_{\mu} - \sum_{i=1}^n \vec{r}_i \quad (\text{II.B.36})$$

Considérant (II.B.35), sa valeur moyenne dans l'état Ψ est,

$$\langle \vec{\mu} \rangle = \frac{\int \Psi^* \left[\sum_{\mu=1}^N Z_{\mu} \vec{R}_{\mu} \right] \Psi d\tau + \int \Psi^* \left[\sum_{i=1}^n \vec{r}_i \right] \Psi d\tau}{\int \Psi^* \Psi d\tau} \quad (\text{II.B.37})$$

Et dans l'approximation de Born-Oppenheimer avec Ψ normalisé on a,

$$\langle \vec{\mu} \rangle = \sum_{\mu=1}^N Z_{\mu} \vec{R}_{\mu} - \int \Psi^* \left[\sum_{i=1}^n \vec{r}_i \right] \Psi d\tau \quad (\text{II.B.38})$$

Les formats explicites du fichier de données correspondant à PA60 sont présentés en annexe I.

CHAPITRE III

CALCULS

III.A. Détermination de la base.

On utilise une base de FG contractées calculées pour une série d'atomes neutres et d'ions importants (Huzinaga, 1984). Le schème de contraction le plus simple est équivalent à celui de FS-3G mais la qualité de la base par rapport aux formes des orbitales est près de celle de FS double-zéta. Des fonctions de polarisation ont aussi été déterminées. Les exposants ainsi que les coefficients des OA pour les atomes neutres N, O et Mg, et pour l'ion Mg^{2+} sont donnés au tableau 1.

La qualité de la base peut être accrue en divisant les fonctions de valence contractées en fonctions de moindre contraction, laissant ainsi plus de flexibilité. Prenons comme exemple la fonction 2p pour N. Du tableau 1 on a,

$$\chi_{N2p_x} = x \left[0,1159195 \exp(-6,1203500 r^2) + 0,4699582 \exp(-1,2593800 r^2) + 0,6184476 \exp(-0,29145000 r^2) \right] \quad (\text{III.A.1})$$

, avec des expressions semblables pour χ_{N2p_y} et χ_{N2p_z} en changeant le préfacteur par y et z respectivement. On peut exprimer l'orbitale χ_{N2p_x} par deux contractions, soit,

Tableau 1
Base de FG contractées à 3G pour N, O, Mg et Mg^{2+} .

Atome	Orbitale	Exposant	Coefficient
N	1s	218,36449	0,0678703
		32,598890	0,3902018
		6,9173900	0,6700832
N	2s	8,3263800	-0,0808903
		0,65919000	0,5672020
		0,21009000	0,5110918
N	2p	6,1203500	0,1159195
		1,2593800	0,4699582
		0,29145000	0,6184476
O	1s	281,86658	0,0690599
		42,416000	0,3931595
		9,0956200	0,6656691
O	2s	11,466030	-0.0808199
		0,88786000	0,5820895
		0,27880000	0,4971596
O	2p	8,0472400	0,1242709
		1,6684200	0,4765935
		0,37251000	0,6130445
Mg	1s	650,64367	0,0680297
		98,370780	0,3907384
		21,322490	0,6672673

Tableau 1 (suite)

Atome	Orbitale	Exposant	Coefficient
Mg	2s	27,977380	-0,0867195
		2,3265200	0,5856969
		0,81808000	0,4864974
Mg	3s	0,91134000	-0,1276505
		0,09940000	0,6507728
		0,03623000	0,4362719
Mg	2p	23,216630	0,1214603
		5,0022200	0,4792914
		1,2046500	0,5989417
Mg ²⁺	1s	654,89097	0,0675674
		98,727577	0,3901195
		21,335201	0,6683850
Mg ²⁺	2s	28,128657	-0,0863368
		2,2951125	0,5978077
		0,79975294	0,4746430
Mg ²⁺	2p	23,805108	0,1182192
		5,1165930	0,4743816
		1,2313920	0,6051010
Mg ²⁺	3d*	3,444	1,000000

3d* est une fonction de polarisation.

$$\chi'_{N2p_x} = x \left[0,1159195 \exp(-6,1203500 r^2) + 0,4699582 \exp(-1,2593800 r^2) \right] \quad (\text{III.A.2.a})$$

, et,

$$\chi''_{N2p_x} = x \left[\exp(-0,29145000 r^2) \right] \quad (\text{III.A.2.b})$$

Une fois normalisées par les programmes PA30A et PA30B on a,

$$\chi'_{N2p_x} = x \left[0,2160775 \exp(-6,1203500 r^2) + 0,8760166 \exp(-1,2593800 r^2) \right] \quad (\text{III.A.3.a})$$

, et,

$$\chi''_{N2p_x} = x \left[1,000000 \exp(-0,29145000 r^2) \right] \quad (\text{III.A.3.b})$$

et bien sûr, (III.A.3.b) est identique à (III.A.3.a). Ainsi les coefficients des FG contractées sont déterminés dans le calcul CSC moléculaire plutôt qu'atomique. L'ajout de fonctions de polarisation augmente aussi la flexibilité du calcul dans les régions de valence.

III.B. Détermination de la matrice de transformation.

Soit, par exemple, le fragment $\text{Mg}^{2+}\text{N}_4\text{O}$ (fig. 5) représenté

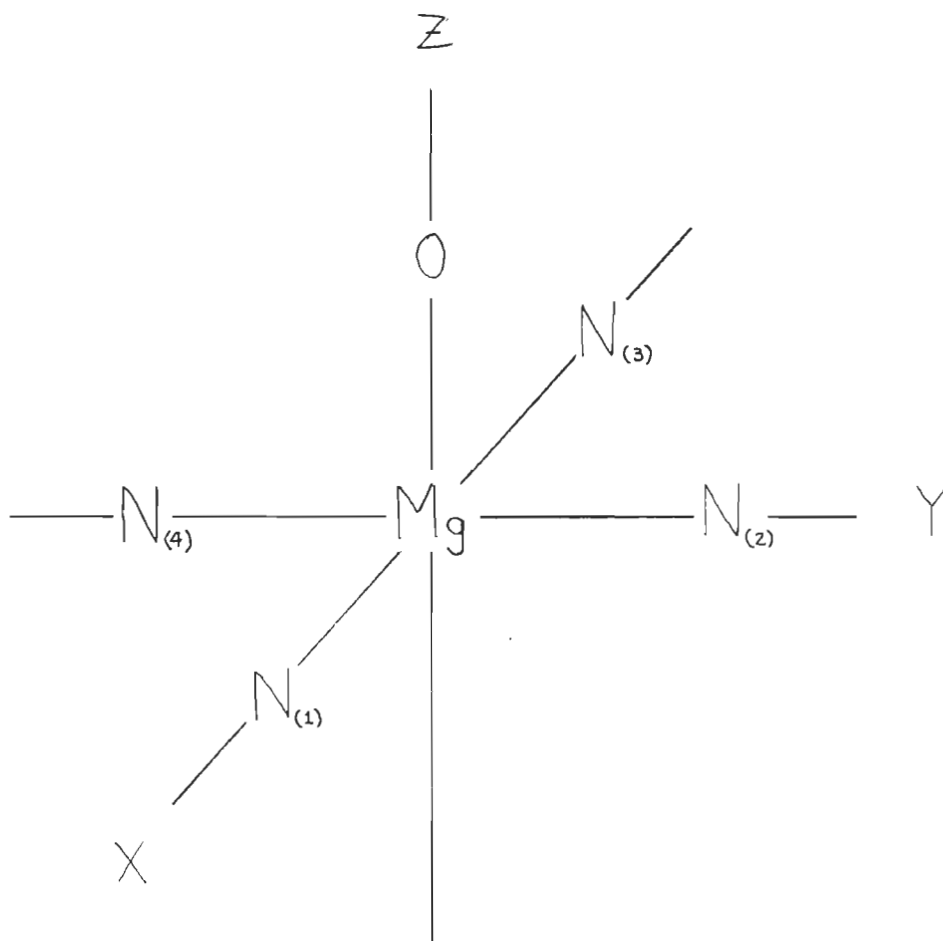


Figure 5. Géométrie de base du fragment $\text{Mg}^{2+}\text{N}_4\text{O}$.

dans une base minimum. Ce fragment appartient au groupe C_{4v} dont la table des caractères est donnée en annexe J. On numérote d'abord les différentes fonctions de la base (tableau 2) en groupant les OA 1s et 2s sur chaque atome puisqu'elles possèdent les mêmes propriétés de symétrie. Le format d'expansion sera donc, dans l'ordre des fonctions; 2, 1, 1, 1, 2, 1, 1, 1, 2, 1, 1, 1, 2, 1, 1, 1, 2, 1, 1, 1. Considérons maintenant les opérations formant le groupe C_{4v} , en excluant l'opération d'identité, dans l'ordre; C_2 , C_4 , C_4^3 , $\sigma_v^{y=0}$, $\sigma_v^{x=0}$, $\sigma_d^{x=y}$, $\sigma_d^{x=-y}$. Appliquons chacune des opérations à la fonction #1 en considérant la figure 6,

$$\begin{aligned}
 C_2(\#1) &= \#1 \\
 C_4(\#1) &= \#1 \\
 C_4^3(\#1) &= \#1 \\
 \sigma_v^{y=0}(\#1) &= \#1 \\
 \sigma_v^{x=0}(\#1) &= \#1 \\
 \sigma_d^{x=y}(\#1) &= \#1 \\
 \sigma_d^{x=-y}(\#1) &= \#1
 \end{aligned}
 \tag{III.B.1}$$

, soit l'entrée au fichier de PA20A,

$$\begin{array}{ccccccc}
 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1
 \end{array}
 \tag{III.B.2}$$

Pour la fonction #2,

$$\begin{aligned}
 C_2(\#2) &= -\#2 \\
 C_4(\#2) &= \#3 \\
 C_4^3(\#2) &= -\#3 \\
 \sigma_v^{y=0}(\#2) &= \#2 \\
 \sigma_v^{x=0}(\#2) &= -\#2 \\
 \sigma_d^{x=y}(\#2) &= \#3 \\
 \sigma_d^{x=-y}(\#2) &= -\#3
 \end{aligned}
 \tag{III.B.3}$$

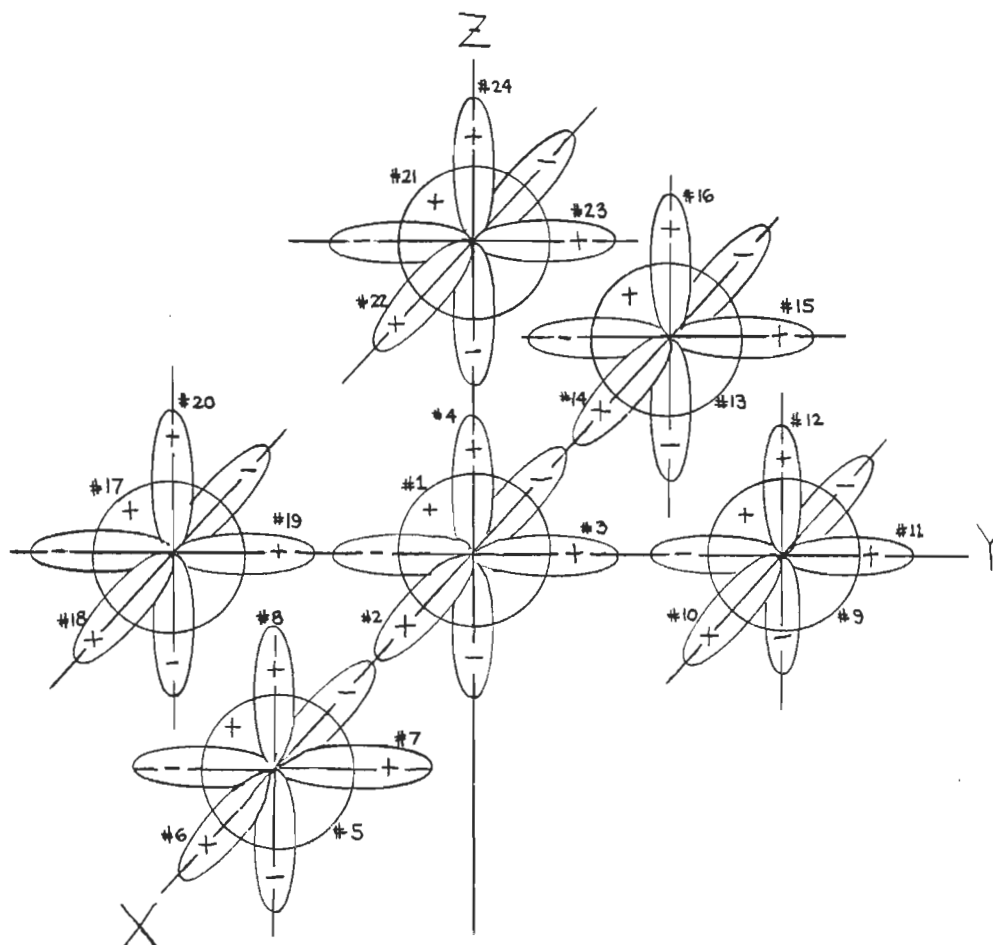


Figure 6. Positions des fonctions de la base minimum avec indication des phases pour le fragment $\text{Mg}^{2+}\text{N}_4\text{O}$.

Tableau 2
 Numérotation des fonctions de la base minimum de $\text{Mg}^{2+}\text{N}_4\text{O}$.

Numéro de la fonction	OA associée(s)	Centre de la fonction
1	1s et 2s	Mg^{2+}
2	$2p_x$	
3	$2p_y$	
4	$2p_z$	
5	1s et 2s	$\text{N}_{(1)}$
6	$2p_x$	
7	$2p_y$	
8	$2p_z$	
9	1s et 2s	$\text{N}_{(2)}$
10	$2p_x$	
11	$2p_y$	
12	$2p_z$	
13	1s et 2s	$\text{N}_{(3)}$
14	$2p_x$	
15	$2p_y$	
16	$2p_z$	
17	1s et 2s	$\text{N}_{(4)}$
18	$2p_x$	
19	$2p_y$	
20	$2p_z$	

Tableau 2 (suite)

Numéro de la fonction	OA associée(s)	Centre de la fonction
21	1s et 2s	0
22	$2p_x$	
23	$2p_y$	
24	$2p_z$	

, soit l'entrée,

$$\begin{array}{cccccc} -2 & 3 & -3 & 2 & -2 & 3 & -3 \end{array} \quad (\text{III.B.4})$$

Pour la fonction #5,

$$\begin{aligned} C_2(\#5) &= \#13 \\ C_4(\#5) &= \#9 \\ C_4^3(\#5) &= \#17 \\ \sigma_v^{y=0}(\#5) &= \#5 \\ \sigma_v^{x=0}(\#5) &= \#13 \\ \sigma_d^{x=y}(\#5) &= \#9 \\ \sigma_d^{x=-y}(\#5) &= \#17 \end{aligned} \quad (\text{III.B.5})$$

, soit l'entrée,

$$\begin{array}{cccccc} 13 & 9 & 17 & 5 & 13 & 9 & 17 \end{array} \quad (\text{III.B.6})$$

Pour la fonction #6,

$$\begin{aligned} C_2(\#6) &= -\#14 \\ C_4(\#6) &= \#11 \\ C_4^3(\#6) &= -\#19 \\ \sigma_v^{y=0}(\#6) &= \#6 \\ \sigma_v^{x=0}(\#6) &= -\#14 \\ \sigma_d^{x=y}(\#6) &= \#11 \\ \sigma_d^{x=-y}(\#6) &= -\#19 \end{aligned} \quad (\text{III.B.7})$$

, soit l'entrée,

$$\begin{array}{cccccc} -14 & 11 & -19 & 6 & -14 & 11 & -19 \end{array} \quad (\text{III.B.8})$$

Et de façon similaire pour les autres fonctions.

III.C. Détermination des fonctions de symétrie.

Soit, par exemple, le fragment $\text{Mg}^{2+}\text{N}_4\text{O}$ appartenant au groupe \mathcal{C}_{4v} . L'opérateur de projection (II.B.28) associé à la représentation A_1 est donné par,

$$\mathcal{P}_{A_1} = \frac{1}{8} \left[1 \cdot E + 1 \cdot C_2 + 1 \cdot C_4 + 1 \cdot C_4^3 + 1 \cdot \sigma_v^{y \cdot o} + 1 \cdot \sigma_v^{x \cdot o} + 1 \cdot \sigma_d^{x \cdot y} + 1 \cdot \sigma_d^{x \cdot y} \right] \quad (\text{III.C.1})$$

L'application de ce projecteur sur la fonction #1, par exemple, donne,

$$\mathcal{P}_{A_1}(\#1) = \frac{1}{8} \left[\#1 + \#1 + \#1 + \#1 + \#1 + \#1 + \#1 + \#1 \right] = \#1 \quad (\text{III.C.2})$$

, soit l'entrée au fichier de PA40,

$$1 \quad 1.0 \quad (\text{III.C.3})$$

Appliquons \mathcal{P}_{A_1} sur la fonction #6, on a,

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_{A_1}(\#6) &= \frac{1}{8} \left[\#6 + (-\#14) + \#11 + (-\#19) + \#6 + (-\#14) + \#11 + (-\#19) \right] \\ &= \frac{1}{4} \left[\#6 + \#11 - \#14 - \#19 \right] \end{aligned} \quad (\text{III.C.4})$$

, soit l'entrée,

$$6 \quad 0.25 \quad 11 \quad 0.25 \quad 14 \quad -0.25 \quad 19 \quad -0.25 \quad (\text{III.C.5})$$

Soit maintenant l'opérateur de projection associé à la représentation E donné par,

$$\mathcal{P}_E = \frac{2}{8} \left[2 \cdot E - 2 \cdot C_2 \right] \quad (\text{III.C.6})$$

L'application de ce projecteur sur la fonction # 5 donne,

$$P_E(\#5) = \frac{1}{2} \left[\#5 - \#13 \right] \quad (\text{III.C.7})$$

, soit l'entrée,

$$\begin{matrix} 5 & 0,5 & & 13 & -0,5 \end{matrix} \quad (\text{III.C.8})$$

Pour chaque représentation, on détermine l'opérateur de projection associé qu'on applique sur toutes les fonctions de base pour ainsi trouver toutes les fonctions de symétrie linéairement indépendantes.

III.D. Détermination de la configuration électronique.

Pour chaque fragment, l'estimation des OM est déterminée à partir de la partie monoélectronique de la matrice initiale de Fock diagonalisée, soit l'étape A.3.c de l'algorithme de PA40. On assigne alors les électrons deux par deux aux OM. On commence par l'OM de plus basse énergie jusqu'à ce que tous les électrons aient été placés. Le calcul CSC du type "closed-shell" est alors réalisé.

Si, lorsqu'il ne reste que deux électrons à assigner et que le niveau à utiliser est doublement dégénéré, alors un électron est placé dans chacune de ces OM. Le calcul CSC du type "open shell" est alors réalisé.

On dit que la configuration électronique ainsi déterminée

est "l'état fondamental" du système considéré.

Soit, par exemple, le fragment $\text{Mg}^{2+}\text{N}_4\text{O}$ représenté dans une base minimum. Le nombre explicite de fonctions de base est de 30 d'où on aura 30 OM soit 10 du type A_1 (puisque'il existe 10 fonctions de symétrie explicites du type A_1), 1 du type A_2 , 4 du type B_1 , 1 du type B_2 et 14 du type E. En utilisant des lettres minuscules pour nommer les OM l'ordre croissant des énergies de ces OM estimées donne: $1a_1$, $2a_1$, $1b_1$, $1e$, $2e$, $3a_1$, $4a_1$, $3e$, $4e$, $5a_1$, $6a_1$, $7a_1$, $5e$, $6e$, $2b_1$, $8a_1$, $1b_2$, $7e$, $8e$, $1a_2$, $9a_1$, $9e$, $10e$, $11e$, $12e$, $3b_1$, $10a_1$, $13e$, $14e$, $4b_1$. Le fragment a 46 électrons et la configuration étudiée est donc: $(1a_1)^2 (2a_1)^2 (1b_1)^2 (1e)^4 (3a_1)^2 (4a_1)^2 (2e)^4 (5a_1)^2 (6a_1)^2 (7a_1)^2 (3e)^4 (2b_1)^2 (8a_1)^2 (1b_2)^2 (4e)^4 (1a_2)^2 (9a_1)^2 (5e)^4$, où on a groupé les OM doublement dégénérées.

III.E. Calcul des OM.

III.E.1. Le fragment $\text{Mg}^{2+}\text{N}_4\text{O}$.

On étudie une géométrie idéalisée pyramidale à base carrée (fig. 5) où les distances entre les différents atomes sont des moyennes calculées à partir du "meilleur ensemble de liaisons" pour la chlorophylle a (Kratky, 1977). Les moyennes ici calculées sont: $\text{Mg-O} = 3,851$ u.a. et $\text{Mg-N} = 3,898$ u.a. pour les N dans le même plan que Mg et, $\text{Mg-N} = 3,950$ u.a. pour les N dans un plan en-dessous du Mg.

On fait d'abord un calcul avec les N dans le même plan que Mg dans la base minimum. Les fichiers de données pour

PA20A (tableau 3), PA20B (tableau 4), PA30A (tableau 5), PA30B (tableau 6) et PA40 (tableau 7) sont déterminés. La configuration électronique étudiée est: $(1a_1)^2 (2a_1)^2 (1b_1)^2 (1e)^4 (3a_1)^2 (4a_1)^2 (2e)^4 (5a_1)^2 (6a_1)^2 (7a_1)^2 (3e)^4 (2b_1)^2 (8a_1)^2 (1b_2)^2 (4e)^4 (1a_2)^2 (9a_1)^2 (5e)^4$. Après 100 itérations on obtient les paramètres énergétiques de l'état considéré (tableau 8) et les OM explicites (tableau 9). Le fichier de données pour PA59 est déterminé (tableau 10). On obtient les analyses de population de Mulliken (tableau 11) et de recouvrement (tableau 12). Le fichier de données pour PA60 (tableau 13) est déterminé. On obtient les moments dipolaire (tableau 14) et quadrupolaires (tableau 15).

On fait un deuxième calcul pour la même géométrie et la même configuration électronique que précédemment mais dans une base de valence divisée avec une fonction de polarisation sur Mg. Les fichiers de données pour PA20A (tableau 16), PA20B (tableau 4), PA30A (tableau 17), PA30B (tableau 6) et PA40 (tableau 18) sont déterminés. Après 150 itérations on obtient les paramètres énergétiques de l'état considéré (tableau 19) et les OM explicites (tableau 20). On obtient les analyses de population de Mulliken (tableau 21) et de recouvrement (tableau 22). On obtient le moment dipolaire (tableau 23).

Un troisième calcul est effectué aussi dans une base de VD mais avec les N dans un plan en-dessous du Mg. La coordonnée en Z pour un N est alors de -0,639 u.a. Après 150 itérations on obtient les paramètres énergétiques de l'état con-

sidéré (tableau 24) et les OM explicites (tableau 25). On obtient les analyses de population de Mulliken (tableau 26) et de recouvrement (tableau 27). On obtient les moments dipolaires (tableau 28) et quadrupolaires (tableau 29).

III.E.2. Le fragment Mg^{2+}N_4 .

On étudie une géométrie idéalisée plane avec la même distance $\text{Mg-N} = 3,898$ u.a. que celle utilisée à la section précédente.

On fait d'abord un calcul dans la base minimum. Les fichiers de données pour PA20A (tableau 30), PA20B (tableau 4), PA30A (tableau 31) et PA30B (tableau 6) sont déterminés. La configuration de l'état fondamental "closed-shell" étudiée est: $(1a_{1g})^2 (1b_{1g})^2 (1e_u)^4 (2a_{1g})^2 (3a_{1g})^2 (2e_u)^4 (1a_{2u})^2 (4a_{1g})^2 (3e_u)^4 (2b_{1g})^2 (1b_{2g})^2 (4e_u)^4 (1a_{2g})^2 (1e_g)^4$. Le fichier de données pour PA40 (tableau 34) correspondant à cet état est déterminé. Après 28 itérations on obtient les paramètres énergétiques (tableau 35) et les OM explicites (tableau 36). On obtient les analyses de population de Mulliken (tableau 37) et de recouvrement (tableau 38). Une autre configuration électronique "closed-shell" est étudiée par le biais du fichier de données pour PA40 (tableau 32) pour obtenir les paramètres énergétiques (tableau 33) de l'état considéré. La configuration de l'état fondamental "open-shell" étudiée est: $(1a_{1g})^2 (1b_{1g})^2 (1e_u)^4 (2a_{1g})^2 (3a_{1g})^2 (2e_u)^4 (1a_{2u})^2 (4a_{1g})^2 (3e_u)^4 (2b_{1g})^2 (1b_{2g})^2 (4e_u)^4 (1a_{2g})^2 (1e_g)^2 (2a_{2u})^2$. Le fichier de

données pour PA41 (tableau 43) correspondant à cet état est déterminé. Après 28 itérations on obtient les paramètres énergétiques (tableau 44) et les OM explicites (tableau 45). On obtient les analyses de population de Mulliken (tableau 46) et de recouvrement (tableau 47). Deux autres configurations électroniques "open-shell" sont étudiées par le biais des fichiers de données pour PA41 (tableaux 39 et 41) pour obtenir les paramètres énergétiques (tableaux 40 et 42) des états considérés.

On fait un deuxième calcul mais dans la base de VD avec une fonction de polarisation sur Mg. Les fichiers de données pour PA20A (tableau 48), PA20B (tableau 4), PA30A (tableau 49), et PA30B (tableau 6) sont déterminés. L'état fondamental "closed-shell" est réétudié par le biais du fichier de données pour PA40 (tableau 50) pour obtenir les paramètres énergétiques (tableau 51) de l'état considéré et les OM explicites (tableau 52). On obtient les analyses de population de Mulliken (tableau 53) et de recouvrement (tableau 54). L'état fondamental "open-shell" est étudié par le biais du fichier de données pour PA41 (tableau 55) pour obtenir les paramètres énergétiques (tableau 56) de l'état considéré et les OM explicites (tableau 57). On obtient les analyses de population de Mulliken (tableau 58) et de recouvrement (tableau 59).

III.E.3. Le fragment MgN_4 .

On étudie une géométrie idéalisée plane avec la même distance $\text{Mg-N} = 3,898$ u.a. que celle utilisée à la section précédente.

On fait un calcul dans la base minimum. Les fichiers de données pour PA20A (tableau 60), PA20B (tableau 4), PA30A (tableau 61), PA30B (tableau 6) et PA40 (tableau 62) sont déterminés. La configuration électronique étudiée est :

$(1a_{1g})^2 (2a_{1g})^2 (1b_{1g})^2 (1e_u)^4 (3a_{1g})^2 (2e_u)^4 (1a_{2u})^2 (4a_{1g})^2$
 $(3e_u)^4 (2b_{1g})^2 (1b_{2g})^2 (4e_u)^4 (1a_{2g})^2 (2a_{2u})^2 (1e_g)^4$. Après 12 itérations on obtient les paramètres énergétiques (tableau 63) de l'état considéré et les OM explicites (tableau 64). On obtient les analyses de population de Mulliken (tableau 65) et de recouvrement (tableau 66).

Tableau 3
Données pour PA20A du fragment $\text{Mg}^{2+}\text{N}_4\text{O}$ dans une base minimum.

MG(2+)N40,C4V, MG(2+)=[11/1], N=[11/1], O=[11/1], PA20A

[illegible]

Tableau 4

Données pour PA20B du fragment $\text{Mg}^{2+}\text{N}_4\text{O}$ dans une base minimum.

MG(2+)N4O,C4V,MG(2+)=[11/11],N=[11/11],O=[11/11],PA208
1 1 1
MGNLST

Tableau 6

Données pour PA30B du fragment $\text{Mg}^{2+}\text{N}_4\text{O}$ dans une base minimum.

MG(2+)N4O,C4V, MG(2+)=(33/3)=[11/1], N=(33/3)=[11/1], O=(33/3)=[11/1], PA30B

1 0 0

1

MGNLST MGNINI

1.000000000E-12 1.0

Tableau 8
Energies relatives à l'itération 100 pour $Mg^{2+}N_4O$.

MG(2+)N4O,C4V,MG(2+)=(33/3)=(11/1),N=(33/3)=(11/1),O=(33/3)=(11/1),PA=0
PA40 CLOSED SHELL HARTREE-FOCK SELF-CONSISTENT-FIELD L.C.A.O. METHOD
RESULTS OF ITERATION 100

	PRESENT ITERATION	PREVIOUS ITERATION	CHANGE
KINETIC ENERGY, T =	488.0238000244	488.0239773084	-.0001772840
ONE ELECTRON POTENTIAL ENERGY, V(1) =	-1538.5169995969	-1538.5174259586	.0004263617
ONE ELECTRON ENERGY, H = T+V(1) =	-1050.4931995726	-1050.4934486502	.0002490776
TWO ELECTRON POTENTIAL ENERGY, V(1,2) =	363.4214601141	363.4217422885	-.0002821744
ELECTRONIC POTENTIAL ENERGY, V(E) = V(1)+V(1,2) =	-1175.0955394828	-1175.0956836761	.0001441873
ELECTRONIC ENERGY, E(E) = H+V(1,2) =	-687.0717394585	-687.0717063617	-.0000330968
NUCLEAR REPULSION ENERGY, V(N) =	200.1319279364	200.1319279364	
POTENTIAL ENERGY, V = V(E)+V(N) =	-974.9636115464	-974.9637557337	.0001441873
VIRIAL, -V/T =	1.9977788204	1.9977783901	
TOTAL ENERGY, E = E(E)+V(N) =	-486.9398115221	-486.9397784253	-.0000330968

ORBITAL ENERGIES (VALUES OF PREVIOUS ITERATION IN PARENTHESES)

1. A1	ORBITALS, (10) (1 - 10)						
	-49.31888919 (-49.31886875)	-20.86664398 (-20.86602152)	-16.02491930 (-16.02491889)	-4.39515700 (-4.39513890)			
	-2.88777506 (-2.88775772)	-1.67004505 (-1.67003957)	-1.47893626 (-1.47893533)	-.97826946 (-.97825636)			
	-.77983278 (-.77983937)	-.40213024 (-.40211983)					
2. A2	ORBITALS, (1) (11 - 11)						
	-.88473616 (-.88473707)						
3. B1	ORBITALS, (4) (12 - 15)						
	-16.02566405 (-16.02566365)	-1.43629736 (-1.43629644)	-.55732303 (-.55732400)	-.38332929 (-.38332634)			
4. B2	ORBITALS, (1) (16 - 16)						
	-.94860169 (-.94860193)						
5. E	ORBITALS, (14) (17 - 30)						
	-16.02528995 (-16.02528955)	-16.02528995 (-16.02528955)	-2.88974299 (-2.88972458)	-2.88974299 (-2.88972458)			
	-1.45642625 (-1.45642477)	-1.45642625 (-1.45642477)	-.91895372 (-.91895416)	-.91895372 (-.91895416)			
	-.77457532 (-.77456257)	-.77457532 (-.77456257)	-.56386500 (-.56388197)	-.56386500 (-.56388197)			
	-.39102750 (-.39102041)	-.39102750 (-.39102041)					

COMPUTED ENERGY ELAPSED TIME = .000 SECONDS

FINISHED SCF ELAPSED TIME = .003 SECONDS

Tableau 9
OM de l'itération 100 pour $\text{Mg}^{2+}\text{N}_4\text{O}$.

MG(2+)N4O,C4V,MG(2+)= (33/3)= [11/1],N= (33/3)= [11/1],O= (33/3)= [11/1],PA40										
MOLECULAR ORBITALS										
ITERATION 100										
ROW	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
1A1	-49.3188892	1.00000								
1	-.9903001	-.0398951	0.0000000	0.0000000	.0000083	-.000092	.0005144	-.0009970	0.0000000	-.0000097
	-.0000942	.0005144	0.0000000	-.0009970	-.0000097	-.0001942	.0005144	-.0009970	0.0000000	-.0000097
	-.0000942	.0005144	0.0000000	.0009970	-.0000097	-.0001566	.0003134	0.0000000	0.0000000	-.0006612
2A1	-20.8660440	1.00000								
2	.0000905	-.0004172	0.0000000	0.0000000	-.0004360	.0000263	-.0002606	.0002627	0.0000000	-.0003041
	.0000263	-.0002606	0.0000000	-.0002627	-.0003041	.0000263	-.0002606	-.0002627	0.0000000	-.0003041
	.0000263	-.0002606	0.0000000	-.0002627	-.0003041	.9921254	.0357663	0.0000000	0.0000000	-.0005198
3A1	-16.0249193	1.00000								
3	.0002762	-.0014512	0.0000000	0.0000000	.0000213	.4963294	.0170959	.0002299	0.0000000	.0000508
	.4963294	.0170959	0.0000000	.0002299	.0000508	.4963294	.0170959	-.0002299	0.0000000	.0000508
	.4963294	.0170959	0.0000000	-.0002299	.0000508	.0001656	-.0005438	0.0000000	0.0000000	.0005779
4A1	-4.3951570	1.00000								
4	.2689829	-.0248713	0.0000000	0.0000000	.0065163	.0004451	-.0018121	.0018906	0.0000000	.0000174
	.0004451	-.0018121	0.0000000	.0018906	.0000174	.0004451	-.0018121	-.0018906	0.0000000	.0000174
	.0004451	-.0018121	0.0000000	-.0018906	.0000174	.0004124	-.0016510	0.0000000	0.0000000	.0017723
5A1	-2.8877751	1.00000								
5	-.0015550	.0058981	0.0000000	0.0000000	.9989676	.0000246	-.0001116	.0000143	0.0000000	.0028937
	.0000246	-.0001116	0.0000000	-.0000143	.0028937	.0000246	-.0001116	-.0000143	0.0000000	.0028937
	.0000246	-.0001116	0.0000000	-.0000143	.0028937	-.0035842	.0149072	0.0000000	0.0000000	-.0164678
6A1	-1.6700451	1.00000								
6	.0052458	-.0259789	0.0000000	0.0000000	-.0336067	-.0082541	.0353278	-.0163976	0.0000000	.0052500
	-.0082541	.0353278	0.0000000	-.0163976	.0052500	-.0082541	.0353278	.0163976	0.0000000	.0052500
	-.0082541	.0353278	0.0000000	.0163976	.0052500	-.2390783	1.0070287	0.0000000	0.0000000	-.1255408
7A1	-1.4789363	1.00000								
7	-.0118012	.0626847	0.0000000	0.0000000	-.0019369	.1139095	-.4916070	.0817696	0.0000000	.0067244
	.1139095	-.4916070	0.0000000	.0817696	.0007244	.1139095	-.4916070	-.0817696	0.0000000	.0067244
	.1139095	-.4916070	0.0000000	-.0817696	.0007244	-.0240291	.1029792	0.0000000	0.0000000	.0107227
8A1	-.9782695	1.00000								
8	-.0067015	.0326611	0.0000000	0.0000000	.0423594	-.0071223	.0310595	-.0438585	0.0000000	-.0221960
	-.0071223	.0310595	0.0000000	.0438585	-.0221960	-.0071223	.0310595	-.0438585	0.0000000	-.0221960
	-.0071223	.0310595	0.0000000	-.0438585	-.0221960	-.0304828	.1304074	0.0000000	0.0000000	.9636716
9A1	-.7798328	1.00000								
9	.0142429	-.0762627	0.0000000	0.0000000	.0040944	.0217335	-.0952289	-.4796688	0.0000000	.0501905
	.0217335	-.0952289	0.0000000	-.4796688	.0501905	.0217335	-.0952289	.4796688	0.0000000	.0501905
	.0217335	-.0952289	0.0000000	.4796688	.0501905	.0062707	-.0272740	0.0000000	0.0000000	.1277859
10A1	-.4021302	1.00000								
10	.0019456	-.0101801	0.0000000	0.0000000	.0158456	.0027292	-.0117794	-.0502083	0.0000000	-.4947979
	.0027292	-.0117794	0.0000000	-.0502083	-.4947979	.0027292	-.0117794	.0502083	0.0000000	-.4947979
	.0027292	-.0117794	0.0000000	.0502083	-.4947979	-.0053176	.0233801	0.0000000	0.0000000	-.0549258
1A2	-.8847362	1.00000								
11	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.5113586	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	-.5113586	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.5113586	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	.5113586	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000

Tableau 9 (suite)

181	-16.0256641	1.00000								
12	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.4961536	.0179783	-.0006354	0.0000000	.0000366
	-.4961536	-.0179783	0.0000000	.0006354	-.0000366	.4961536	.0179783	.0006354	0.0000000	.0000366
	-.4961536	-.0179783	0.0000000	-.0006354	-.0000366	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
281	-1.4362974	1.00000								
13	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.1190514	.5160276	-.0572778	0.0000000	-.0018837
	.1190514	-.5160276	0.0000000	.0572778	.0018837	-.1190514	.5160276	.0572778	0.0000000	-.0018837
	.1190514	-.5160276	0.0000000	-.0572778	.0018837	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
381	-.5573230									
14	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.0093071	.0401257	.5027311	0.0000000	-.0734797
	.0093071	-.0401257	0.0000000	-.5027311	.0734797	-.0093071	.0401257	-.5027311	0.0000000	-.0734797
	.0093071	-.0401257	0.0000000	.5027311	.0734797	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
481	-.3833293									
15	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.0018637	.0078870	.0741101	0.0000000	.4969994
	.0018637	-.0078870	0.0000000	-.0741101	.4969994	-.0018637	.0078870	-.0741101	0.0000000	.4969994
	.0018637	-.0078870	0.0000000	.0741101	.4969994	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
182	-.9486017	1.00000								
16	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.4893918	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	.4893918	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.4893918	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	-.4893918	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
1E	-16.0252900	1.00000								
17	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.0008457	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.0006983	0.0000000
	.7017917	.0247989	0.0000000	-.0002790	.0000626	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.0006983	0.0000000
	-.7017917	-.0247989	0.0000000	-.0002790	-.0000626	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.0003922	0.0000000
2E	-16.0252900	1.00000								
18	0.0000000	0.0000000	-.0008457	0.0000000	0.0000000	.7017917	.0247989	-.0002790	0.0000000	.0000626
	0.0000000	0.0000000	-.0006983	0.0000000	0.0000000	-.7017917	-.0247989	-.0002790	0.0000000	-.0000626
	0.0000000	0.0000000	-.0006983	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.0003922	0.0000000	0.0000000
3E	-2.8897430	1.00000								
19	0.0000000	0.0000000	.9974349	0.0000000	0.0000000	-.0037237	.0158169	-.0171430	0.0000000	.0006825
	0.0000000	0.0000000	.0029958	0.0000000	0.0000000	.0037237	-.0158169	-.0171430	0.0000000	-.0006825
	0.0000000	0.0000000	.0029958	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.0018125	0.0000000	0.0000000
4E	-2.8897430	1.00000								
20	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.9974349	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.0029958	0.0000000
	-.0037237	.0158169	0.0000000	-.0171430	.0006825	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.0029958	0.0000000
	.0037237	-.0158169	0.0000000	-.0171430	-.0006825	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.0018125	0.0000000
5E	-1.4564262	1.00000								
21	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.0599351	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.0183513	0.0000000
	.1648710	-.7130869	0.0000000	.0968139	.0007073	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.0183513	0.0000000
	-.1648710	.7130869	0.0000000	.0968139	-.0007073	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.0244169	0.0000000
6E	-1.4564262	1.00000								
22	0.0000000	0.0000000	.0599351	0.0000000	0.0000000	.1648710	-.7130869	.0968139	0.0000000	.0007073
	0.0000000	0.0000000	-.0183513	0.0000000	0.0000000	-.1648710	.7130869	.0968139	0.0000000	-.0007073
	0.0000000	0.0000000	-.0183513	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.0244169	0.0000000	0.0000000
7E	-.9189537	1.00000								
23	0.0000000	0.0000000	.0203916	0.0000000	0.0000000	-.0131114	.0578507	.0824832	0.0000000	-.0073726
	0.0000000	0.0000000	-.6985148	0.0000000	0.0000000	.0131114	-.0578507	.0824832	0.0000000	.0073726
	0.0000000	0.0000000	-.6985148	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.0324940	0.0000000	0.0000000
8E	-.9189537	1.00000								
24	0.0000000	0.0000000	.0203916	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.0985148	0.0000000
	-.0131114	.0578507	0.0000000	.0824832	-.0073726	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.0985148	0.0000000

Tableau 9 (suite)

9E	.0131114	-.0578507	0.0000000	.0824832	.0073726	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-0.0324940	0.0000000
25	-.7742753	1.00000								
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-0.0491076	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-0.0927888	0.0000000
	.0180936	-.0790206	0.0000000	-0.4937810	-0.008413	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-0.0927888	0.0000000
	-.0180936	.0790206	0.0000000	-0.4937810	-0.008413	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.7317784	0.0000000
10E	-.7742753	1.00000								
26	0.0000000	0.0000000	0.0491076	0.0000000	0.0000000	-.0180936	.0790206	.4497810	0.0000000	-0.1008413
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.0180936	-.0790206	.4497810	0.0000000	.1008413
	0.0000000	0.0000000	.0927888	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-0.7317784	0.0000000	0.0000000
11E	-.5638650									
27	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-0.0516976	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-0.0647566	0.0000000
	.0113988	-.0495650	0.0000000	-0.5277444	-0.118543	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-0.0647566	0.0000000
	-.0113988	.0495650	0.0000000	-0.5277444	-0.118543	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-0.6712441	0.0000000
12E	-.5638650									
28	0.0000000	0.0000000	-0.0516976	0.0000000	0.0000000	.0113988	-0.0495650	-0.5277444	0.0000000	.0118543
	0.0000000	0.0000000	-0.0647566	0.0000000	0.0000000	-0.0113988	.0495650	-0.5277444	0.0000000	-0.0118543
	0.0000000	0.0000000	-0.0647566	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-0.6712441	0.0000000	0.0000000
13E	-.3910275									
29	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-0.0880382	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-0.071690	0.0000000
	.0032095	-.0137672	0.0000000	-0.0742798	-0.6999059	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-0.071690	0.0000000
	-.0032095	.0137672	0.0000000	-0.0742798	.6999059	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.1148619	0.0000000
14E	-.3910275									
30	0.0000000	0.0000000	.0880382	0.0000000	0.0000000	-0.0032095	.0137672	.0742798	0.0000000	.6999059
	0.0000000	0.0000000	.0071690	0.0000000	0.0000000	.0032095	-.0137672	.0742798	0.0000000	-.6999059
	0.0000000	0.0000000	.0071690	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-0.1148619	0.0000000	0.0000000

MOLECULAR ORBITALS PUNCHED

5	
10	A1
1	A2
4	B1
1	B2

Tableau 10 (suite)

14	E	MG(2+)N40,C4V,MG(2+)=((33/3)=((11/1),N=((33/3)=((11/1),O=((33/3)=((11/1),PA40									
30	30	MOLECULAR ORBITALS PA40 100									
1	1A1	-49318889E+02 1.00000									
-	.99030010E+00	-	.39895063E-01	0.	0.	1	1				
.	.83413146E-05	-	.94246396E-04	.51441636E-03	-.99702367E-03	1	2				
0.		-	.97035935E-05	-.94246396E-04	.51441636E-03	1	3				
0.		-	.99702367E-03	-.97035935E-05	-.94246396E-04	1	4				
.	.51441636E-03	.99702367E-03	0.		-.97035935E-05	1	5				
-	.94246396E-04	.51441636E-03	0.		.99702367E-03	1	6				
-	.97035935E-05	-.56604169E-04	.31344545E-03	0.		1	7				
0.		-.66121604E-03				1	8				
2	2A1	-20866044E+02 1.00000									
.	.90458531E-04	-	.41717803E-03	0.	0.	2	9				
-	.43599944E-03	.26329835E-04	-.26062676E-03	.26270303E-03		2	10				
0.		-.30414285E-03	-.26329835E-04	-.26062676E-03		2	11				
0.		.26270303E-03	-.30414285E-03	.26329835E-04		2	12				
-	.26062676E-03	-.26270303E-03	0.	-.30414285E-03		2	13				
.	.26329835E-04	-.26062676E-03	0.	-.26270303E-03		2	14				
-	.30414285E-03	.99212545E+00	.35766256E-01	0.		2	15				
0.		-.51980087E-03				2	16				
3	3A1	-16024919E+02 1.00000									
.	.27621985E-03	-	.14512421E-02	0.	0.	3	17				
.	.21281369E-04	.49632936E+00	.17095910E-01	.22989771E-03		3	18				
0.		.50774252E-04	.49632936E+00	.17095910E-01		3	19				
0.		.22989771E-03	.50774252E-04	.49632936E+00		3	20				
.	.17095910E-01	-.22989771E-03	0.	.50774252E-04		3	21				
.	.49632936E+00	.17095910E-01	0.	-.22989771E-03		3	22				
.	.50774252E-04	.16563636E-03	-.54384465E-03	0.		3	23				
0.		.57787179E-03				3	24				
4	4A1	-43951570E+01 1.00000									
.	.26898292E+00	-	.10248713E+01	0.	0.	4	25				
.	.65163349E-02	.44513990E-03	-.18121334E-02	.18906219E-02		4	26				
0.		.17428321E-04	.44513990E-03	-.18121334E-02		4	27				
0.		.18906219E-02	.17428321E-04	.44513990E-03		4	28				
-	.18121334E-02	-.18906219E-02	0.	.17428321E-04		4	29				
.	.44513990E-03	-.18121334E-02	0.	-.18906219E-02		4	30				
.	.17428321E-04	.41242467E-03	-.16509830E-02	0.		4	31				
0.		.17723013E-02				4	32				
5	5A1	-28877751E+01 1.00000									
-	.15549627E-02	.58980976E-02	0.	0.		5	33				
.	.99896762E+00	.24578793E-04	-.11156443E-03	.14274453E-04		5	34				
0.		.28937473E-02	.24578793E-04	-.11156443E-03		5	35				
0.		.14274453E-04	.28937473E-02	.24578793E-04		5	36				
-	.11156443E-03	-.14274453E-04	0.	.28937473E-02		5	37				
.	.24578793E-04	-.11156443E-03	0.	-.14274453E-04		5	38				
.	.28937473E-02	-.35841581E-02	.14907177E-01	0.		5	39				
0.		-.16467791E-01				5	40				
6	6A1	-16700451E+01 1.00000									
.	.52457953E-02	-.25978861E-01	0.	0.		6	41				
-	.33606674E-01	-.82541234E-02	.35327835E-01	-.16397576E-01		6	42				
0.		.52499888E-02	-.82541234E-02	.35327835E-01		6	43				
0.		-.16397576E-01	.52499888E-02	-.82541234E-02		6	44				
.	.35327835E-01	.16397576E-01	0.	.52499888E-02		6	45				
-	.82541234E-02	.35327835E-01	0.	.16397576E-01		6	46				
.	.52499888E-02	-.23907831E+00	.10070287E+01	0.		6	47				
0.		-.12554078E+00				6	48				
7	7A1	-14789363E+01 1.00000									
-	.11801248E-01	.62684677E-01	0.	0.		7	49				
-	.19369185E-02	.11390948E+00	-.49160704E+00	.81769606E-01		7	50				
0.		.72435897E-03	.11390948E+00	-.49160704E+00		7	51				
0.		.81769606E-01	.72435897E-03	.11390948E+00		7	52				
-	.49160704E+00	-.81769606E-01	0.	.72435897E-03		7	53				
.	.11390948E+00	-.49160704E+00	0.	-.81769606E-01		7	54				

Tableau 10 (suite)

.72435897E-03	-.24029132E-01	.10297925E+00	0.	7	55
0.	.10722673E-01			7	56
8 8A1	-.97026946E+00	1.000000			
-.67015342E-02	.32661088E-01	0.		8	57
.42359368E-01	-.71222546E-02	.31059498E-01	.43858527E-01	8	58
0.	-.22196001E-01	-.71222546E-02	.31059498E-01	8	59
0.	.43858527E-01	-.22196001E-01	-.71222546E-02	8	60
.31059498E-01	-.43858527E-01	0.	-.22196001E-01	8	61
-.71222546E-02	.31059498E-01	0.	-.43858527E-01	8	62
-.22196001E-01	-.30482751E-01	.13040737E+00	0.	8	63
0.	.98367161E+00			8	64
9 9A1	-.77983278E+00	1.000000			
.14242924E-01	-.76262653E-01	0.		9	65
.40943923E-02	.21733504E-01	-.95228920E-01	-.47966878E+00	9	66
0.	.50190512E-01	.21733504E-01	-.95228920E-01	9	67
0.	-.47966878E+00	.50190512E-01	.21733504E-01	9	68
-.95228920E-01	.47966878E+00	0.	.50190512E-01	9	69
.21733504E-01	-.95228920E-01	0.	.47966878E+00	9	70
.50190512E-01	.62706933E-02	-.27273954E-01	0.	9	71
0.	.12778586E+00			9	72
10 10A1	-.40213024E+00	0.000000			
.19455891E-02	-.10180059E-01	0.		10	73
.15845629E-01	.27291807E-02	-.11779392E-01	-.50208251E-01	10	74
0.	-.49479790E+00	.27291807E-02	-.11779392E-01	10	75
0.	-.50208251E-01	-.49479790E+00	.27291807E-02	10	76
-.11779392E-01	.50208251E-01	0.	-.49479790E+00	10	77
.27291807E-02	-.11779392E-01	0.	.50208251E-01	10	78
-.49479790E+00	.53176116E-02	.23380147E-01	0.	10	79
0.	-.54925798E-01			10	80
11 1A2	-.88473616E+00	1.000000			
0.	0.	0.	0.	11	81
0.	0.	0.	0.	11	82
.51135864E+00	0.	0.	0.	11	83
-.51135864E+00	0.	0.	0.	11	84
0.	0.	-.51135864E+00	0.	11	85
0.	0.	.51135864E+00	0.	11	86
0.	0.	0.	0.	11	87
0.	0.	0.	0.	11	88
12 1B1	-.16025664E+02	1.000000			
0.	0.	0.	0.	12	89
0.	.49615358E+00	.17978324E-01	-.63543969E+03	12	90
0.	.36551345E-04	-.49615358E+00	-.17978324E-01	12	91
0.	.63543969E-03	-.36551345E-04	.49615358E+00	12	92
.17978324E-01	.63543969E-03	0.	.36551345E-04	12	93
-.49615358E+00	-.17978324E-01	0.	-.63543969E-03	12	94
-.36551345E-04	0.	0.	0.	12	95
0.	0.			12	96
13 2B1	-.14362974E+01	1.000000			
0.	0.	0.	0.	13	97
0.	-.11905138E+00	.51602762E+00	-.57277766E-01	13	98
0.	-.18837251E-02	.11905138E+00	-.51602762E+00	13	99
0.	.57277766E-01	.18837251E-02	-.11905138E+00	13	100
.51602762E+00	.57277766E-01	0.	-.18837251E-02	13	101
.11905138E+00	-.51602762E+00	0.	-.57277766E-01	13	102
.18837251E-02	0.	0.	0.	13	103
0.	0.			13	104
14 3B1	-.55732303E+00	0.000000			
0.	0.	0.	0.	14	105
0.	-.93070767E-02	.40125712E-01	.50273114E+00	14	106
0.	-.73479706E-01	.93070767E-02	-.40125712E-01	14	107
0.	-.50273114E+00	.73479706E-01	-.93070767E-02	14	108
.40125712E-01	-.50273114E+00	0.	-.73479706E-01	14	109
.93070767E-02	-.40125712E-01	0.	.50273114E+00	14	110
.73479706E-01	0.	0.	0.	14	111

Tableau 10 (suite)

0.	15	481	0.	- .38332929E+00	0.00000	14	112	
0.	0.	0.	0.	0.	0.	15	113	
0.	0.	0.	0.	- .18637375E-02	.78869767E-02	.74110079E-01	15	114
0.	0.	0.	0.	.49699939E+00	.18637375E-02	- .78869767E-02	15	115
0.	0.	0.	0.	- .74110079E-01	- .49699939E+00	- .18637375E-02	15	116
0.	0.	0.	0.	.78869767E-02	- .74110079E-01	0.	15	117
0.	0.	0.	0.	.18637375E-02	- .78869767E-02	0.	15	118
0.	0.	0.	0.	- .49699939E+00	0.	0.	15	119
0.	0.	0.	0.	0.	0.	0.	15	120
0.	16	182	0.	- .94860169E+00	1.00000	16	121	
0.	0.	0.	0.	0.	0.	0.	16	122
0.	0.	0.	0.	0.	0.	0.	16	123
0.	0.	0.	0.	.48939176E+00	0.	0.	16	124
0.	0.	0.	0.	.48939176E+00	0.	0.	16	125
0.	0.	0.	0.	0.	- .48939176E+00	0.	16	126
0.	0.	0.	0.	0.	- .48939176E+00	0.	16	127
0.	0.	0.	0.	0.	0.	0.	16	128
0.	17	1E	0.	- .16025290E+02	1.00000	17	129	
0.	0.	0.	0.	0.	0.	- .84574892E-03	17	130
0.	0.	0.	0.	0.	0.	0.	17	131
0.	0.	0.	0.	- .69829171E-03	.70179173E+00	.24798870E-01	17	132
0.	0.	0.	0.	- .27901921E-03	.62632957E-04	0.	17	133
0.	0.	0.	0.	0.	- .69829171E-03	0.	17	134
0.	0.	0.	0.	- .70179173E+00	- .24798870E-01	0.	17	135
0.	0.	0.	0.	- .62632957E-04	0.	0.	17	136
0.	0.	0.	0.	- .39221680E-03	0.	0.	17	137
0.	18	2E	0.	- .16025290E+02	1.00000	18	138	
0.	0.	0.	0.	0.	0.	- .84574892E-03	18	139
0.	0.	0.	0.	0.	0.	0.	18	140
0.	0.	0.	0.	.70179173E+00	.24798870E-01	- .27901921E-03	18	141
0.	0.	0.	0.	.62632957E-04	0.	0.	18	142
0.	0.	0.	0.	- .69829171E-03	0.	0.	18	143
0.	0.	0.	0.	- .27901921E-03	0.	0.	18	144
0.	0.	0.	0.	0.	- .69829171E-03	0.	18	145
0.	0.	0.	0.	0.	- .39221680E-03	0.	18	146
0.	19	3E	0.	- .28897430E+01	1.00000	19	147	
0.	0.	0.	0.	0.	0.	.99743493E+00	19	148
0.	0.	0.	0.	0.	0.	0.	19	149
0.	0.	0.	0.	- .37236779E-02	.15816905E-01	- .17142991E-01	19	150
0.	0.	0.	0.	.82547426E-04	0.	0.	19	151
0.	0.	0.	0.	0.	0.	0.	19	152
0.	0.	0.	0.	.29957895E-02	0.	.37236779E-02	19	153
0.	0.	0.	0.	- .15816905E-01	- .17142991E-01	0.	19	154
0.	0.	0.	0.	0.	.29957895E-02	0.	19	155
0.	0.	0.	0.	0.	0.	.18124897E-02	19	156
0.	0.	0.	0.	0.	0.	0.	19	157
0.	20	4E	0.	- .28897430E+01	1.00000	20	158	
0.	0.	0.	0.	0.	0.	.99743493E+00	20	159
0.	0.	0.	0.	0.	0.	0.	20	160
0.	0.	0.	0.	0.	0.	0.	20	161
0.	0.	0.	0.	.29957895E-02	0.	.37236779E-02	20	162
0.	0.	0.	0.	- .15816905E-01	- .17142991E-01	0.	20	163
0.	0.	0.	0.	0.	.29957895E-02	0.	20	164
0.	0.	0.	0.	0.	0.	0.	20	165
0.	0.	0.	0.	0.	0.	0.	20	166
0.	0.	0.	0.	0.	0.	0.	20	167
0.	0.	0.	0.	0.	0.	0.	20	168
0.	21	5E	0.	- .14564262E+01	1.00000	21	169	
0.	0.	0.	0.	0.	0.	.59935055E-01	21	170
0.	0.	0.	0.	0.	0.	0.	21	171
0.	0.	0.	0.	0.	0.	0.	21	172
0.	0.	0.	0.	- .18351298E-01	0.	.16487100E+00	21	173
0.	0.	0.	0.	0.	0.	- .71308692E+00	21	174
0.	0.	0.	0.	0.	0.	0.	21	175
0.	0.	0.	0.	.96813878E-01	- .70732265E-03	0.	21	176
0.	0.	0.	0.	0.	- .18351298E-01	0.	21	177
0.	0.	0.	0.	0.	0.	0.	21	178
0.	0.	0.	0.	0.	0.	0.	21	179
0.	0.	0.	0.	0.	0.	0.	21	180
0.	0.	0.	0.	0.	0.	0.	21	181
0.	0.	0.	0.	0.	0.	0.	21	182
0.	0.	0.	0.	0.	0.	0.	21	183
0.	0.	0.	0.	0.	0.	0.	21	184
0.	0.	0.	0.	0.	0.	0.	21	185
0.	0.	0.	0.	0.	0.	0.	21	186
0.	0.	0.	0.	0.	0.	0.	21	187
0.	0.	0.	0.	0.	0.	0.	21	188
0.	0.	0.	0.	0.	0.	0.	21	189
0.	0.	0.	0.	0.	0.	0.	21	190
0.	0.	0.	0.	0.	0.	0.	21	191
0.	0.	0.	0.	0.	0.	0.	21	192
0.	0.	0.	0.	0.	0.	0.	21	193
0.	0.	0.	0.	0.	0.	0.	21	194
0.	0.	0.	0.	0.	0.	0.	21	195
0.	0.	0.	0.	0.	0.	0.	21	196
0.	0.	0.	0.	0.	0.	0.	21	197
0.	0.	0.	0.	0.	0.	0.	21	198
0.	0.	0.	0.	0.	0.	0.	21	199
0.	0.	0.	0.	0.	0.	0.	21	200

Tableau 10 (suite)

22	6E	-.14564262E+01	1.00000		
0.	0.	.59935055E-01	0.	22	169
0.	0.	.16487100E+00	-.71308692E+00	22	170
0.	0.	.70732265E-03	0.	22	171
-.18351298E-01	0.	0.	-.16487100E+00	22	172
.71308692E+00	.96813878E-01	0.	-.70732265E-03	22	173
0.	0.	-.18351298E-01	0.	22	174
0.	0.	0.	-.24416930E-01	22	175
0.	0.	0.	0.	22	176
23	7E	-.91895372E+00	1.00000		
0.	0.	.20391574E-01	0.	23	177
0.	0.	-.13111367E-01	.57850696E-01	23	178
0.	0.	-.73726029E-02	0.	23	179
-.69851482E+00	0.	0.	.13111367E-01	23	180
-.57850696E-01	.82483221E-01	0.	.73726029E-02	23	181
0.	0.	-.69851482E+00	0.	23	182
0.	0.	0.	-.32494022E-01	23	183
0.	0.	0.	0.	23	184
24	8E	-.91895372E+00	1.00000		
0.	0.	0.	.20391574E-01	24	185
0.	0.	0.	0.	24	186
-.69851482E+00	0.	-.13111367E-01	.57850696E-01	24	187
0.	.82483221E-01	-.73726029E-02	0.	24	188
0.	0.	-.69851482E+00	0.	24	189
.13111367E-01	-.57850696E-01	0.	.82483221E-01	24	190
.73726029E-02	0.	0.	0.	24	191
-.32494022E-01	0.	0.	0.	24	192
25	9E	-.77457532E+00	1.00000		
0.	0.	0.	-.49107561E-01	25	193
0.	0.	0.	0.	25	194
-.92788834E-01	0.	.18093635E-01	-.79020594E-01	25	195
0.	-.44978095E+00	.10084126E+00	0.	25	196
0.	0.	-.92788834E-01	0.	25	197
-.18093635E-01	.79020594E-01	0.	-.44978095E+00	25	198
-.10084126E+00	0.	0.	0.	25	199
.73177843E+00	0.	0.	0.	25	200
26	10E	-.77457532E+00	1.00000		
0.	0.	.49107561E-01	0.	26	201
0.	0.	-.18093635E-01	.79020594E-01	26	202
0.	0.	-.10084126E+00	0.	26	203
.92788834E-01	0.	0.	.18093635E-01	26	204
-.79020594E-01	.44978095E+00	0.	.10084126E+00	26	205
0.	0.	.92788834E-01	0.	26	206
0.	0.	0.	-.73177843E+00	26	207
0.	0.	0.	0.	26	208
27	11E	-.56386500E+00	0.00000		
0.	0.	0.	-.51697570E-01	27	209
0.	0.	0.	0.	27	210
-.64756637E-01	0.	.11398797E-01	-.49565028E-01	27	211
0.	-.52774440E+00	.11854254E-01	0.	27	212
0.	0.	-.64756637E-01	0.	27	213
-.11398797E-01	.49565028E-01	0.	-.52774440E+00	27	214
-.11854254E-01	0.	0.	0.	27	215
-.67124407E+00	0.	0.	0.	27	216
28	12E	-.56386500E+00	0.00000		
0.	0.	-.51697570E-01	0.	28	217
0.	0.	.11398797E-01	-.49565028E-01	28	218
0.	0.	.11854254E-01	0.	28	219
-.64756637E-01	0.	0.	-.11398797E-01	28	220
-.49565028E-01	-.52774440E+00	0.	-.11854254E-01	28	221
0.	0.	-.64756637E-01	0.	28	222
0.	0.	0.	-.67124407E+00	28	223
0.	0.	0.	0.	28	224
29	13E	-.39102750E+00	0.00000		

Tableau 10 (suite)

0.	0.	0.	- .80382454E-02	29	225
0.	0.	0.	0.	29	226
- .71690192E-02	0.	.32095333E-02	- .13767174E-01	29	227
0.	- .74279843E-01	- .69990588E+00	0.	29	228
0.	0.	- .71690192E-02	0.	29	229
- .32095333E-02	.13767174E-01	0.	- .74279843E-01	29	230
.69990588E+00	0.	0.	0.	29	231
.11486192E+00	0.	0.	0.	29	232
30 14E	- .39102750E+00	0.00000			
0.	0.	.80382454E-02	0.	30	233
0.	- .32095333E-02	.13767174E-01	.74279843E-01	30	234
0.	.69990588E+00	0.	0.	30	235
.71690192E-02	0.	0.	.32095333E-02	30	236
- .13767174E-01	.74279843E-01	0.	- .69990588E+00	30	237
0.	0.	.71690192E-02	0.	30	238
0.	0.	0.	- .11486192E+00	30	239
0.	0.	0.	0.	30	240
MG(2+)N40,C4V,MG(2+)= (33/3)= (11/1),N= (33/3)= (11/1),O= (33/3)= (11/1),PA40					
23					
1	1.0				
2	1.0				
3	1.0				
4	1.0				
5	1.0				
6	1.0				
7	1.0				
8	1.0				
9	1.0				
11	1.0				
12	1.0				
13	1.0				
16	1.0				
17	1.0				
18	1.0				
19	1.0				
20	1.0				
21	1.0				
22	1.0				
23	1.0				
24	1.0				
25	1.0				
26	1.0				
7.797					
0	0	0	0		

Tableau 11
Analyse de population de Mulliken pour $Mg^{2+}N_4O$.

MULLIKEN POPULATION ANALYSIS												
MG(2+)N4O,C4V,MG(2+)={33/3}={11/1},N={33/3}={11/1},O={33/3}={11/1},PA59												
			1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
MG(2+) S	1	A1	1.97912	.00000	.00000	.02077	.00000	.00001	.00004	.00001	.00005	.00000
TOTAL IN A1			2.00000									
MG(2+) S	2	A1	.02092	-.00000	-.00000	1.97795	.00007	.00012	.00046	.00011	.00036	.00001
TOTAL IN A1			1.99999									
MG(2+) X	3	E	0.00000	-.00000	1.99377	0.00000	0.00000	.00304	.00026	0.00000	0.00000	.00139
TOTAL IN E			1.99848									
MG(2+) Y	4	E	-.00000	0.00000	0.00000	1.99377	.00304	0.00000	0.00000	.00028	.00139	0.00000
TOTAL IN E			1.99848									
MG(2+) Z	5	A1	.00000	-.00000	-.00000	.00008	1.99737	.00112	.00000	.00125	.00001	.00016
TOTAL IN A1			1.99984									
MG(2+) TOTAL IN A1	ON MG(2+)		5.99983									
TOTAL IN A2	ON MG(2+)		0.00000									
TOTAL IN B1	ON MG(2+)		0.00000									
TOTAL IN B2	ON MG(2+)		0.00000									
TOTAL IN E	ON MG(2+)		3.99696									
TOTAL ON MG(2+)			9.99679									

Tableau 11 (suite)

MULLIKEN POPULATION ANALYSIS													
MG(2+)N40,C4V,MG(2+)=(33/3)=[11/1],N=(33/3)=[11/1],O=(33/3)=[11/1],PA59													
				1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
N1	S	6	A1	-.00000	-.00000	.49604	.00000	.00000	.00002	.00379	.00001	.00013	.00000
			TOTAL IN A1		.50000								
			B1	.49585	.00412	.00002	.00000						
			TOTAL IN B1		.49997								
			E	0.00000	.99190	.00000	0.00000	0.00000	.00792	.00005	0.00000	0.00000	.00009
			TOTAL IN E		.99996								
			TOTAL		1.99993								
N1	S	7	A1	-.00000	-.00000	.00396	.00009	-.00000	.00317	.47581	.00130	.01546	.00022
			TOTAL IN A1		.49978								
			B1	.00415	.49145	.00425	.00015						
			TOTAL IN B1		.49560								
			E	0.00000	.00810	.00107	0.00000	0.00000	.96959	.00300	0.00000	0.00000	.01139
			TOTAL IN E		.00571	.00000	.00034						
			TOTAL		1.98933								
N1	X	8	A1	-.00001	-.00000	-.00000	.00017	-.00000	.00096	.01602	.00493	.47264	.00529
			TOTAL IN A1		.49471								
			B1	-.00000	.00442	.48503	.01055						
			TOTAL IN B1		.00442								
			E	0.00000	.00000	.00197	0.00000	0.00000	.01835	.01748	0.00000	0.00000	.40731
			TOTAL IN E		.54376	.00000	.01114						
			TOTAL		.94423								
N1	Y	9	A2	.50000									
			TOTAL IN A2		.50000								
			B2	.50000									
			TOTAL IN B2		.50000								
			E	-.00000	0.00000	0.00000	.00006	.00162	0.00000	0.00000	.97720	.01450	0.00000
			TOTAL IN E		.00654	0.00000	.00007	0.00000					
			TOTAL		1.99339								
N1	Z	10	A1	-.00000	-.00000	.00000	.00000	.00006	.00018	.00000	.00142	.00492	.49343
			TOTAL IN A1		.00657								
			E	0.00000	.00000	.00000	0.00000	0.00000	.00000	.00012	0.00000	0.00000	.02245
			TOTAL IN E		.00005	.00000	.97738						
			TOTAL		.02257								
			TOTAL		.02914								
N1	TOTAL IN A1			ON N1	1.50106								
	TOTAL IN A2			ON N1	.50000								
	TOTAL IN B1			ON N1	1.00000								
	TOTAL IN B2			ON N1	.50000								
	TOTAL IN E			ON N1	3.45497								
	TOTAL			ON N1	6.95602								

Tableau 11 (suite)

MULLIKEN POPULATION ANALYSIS													
MG(2+)N40,C4V,MG(2+)=(33/3)=[11/1],N=(33/3)=[11/1],O=(33/3)=[11/1],PA59													
				1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
N2	S	11	A1	-.00000	-.00000	.49604	.00000	.00000	.00002	.00379	.00001	.00013	.00000
			TOTAL IN A1		.50000								
			B1	.49585	.00412	.00002	.00000						
			TOTAL IN B1		.49997								
			E	.99190	0.00000	0.00000	.00000	.003792	0.00000	0.00000	.00005	.00009	0.00000
			TOTAL IN E		.99996								
			TOTAL		1.99993								
N2	S	12	A1	-.00000	-.00000	.00396	.00009	-.00000	.00317	.47581	.00130	.01546	.00022
			TOTAL IN A1		.49978								
			B1	.00415	.49145	.00425	.00015						
			TOTAL IN B1		.49560								
			E	.00810	0.00000	0.00000	.00107	.96959	0.00000	0.00000	.00380	.01139	0.00000
			TOTAL IN E		.99395								
			TOTAL		1.98933								
N2	X	13	A2	.50000									
			TOTAL IN A2		.50000								
			B2	.50000									
			TOTAL IN B2		.50000								
			E	0.00000	-.00000	.00006	0.00000	0.00000	.00162	.97720	0.00000	0.00000	.01450
			TOTAL IN E		.99339								
			TOTAL		1.99339								
N2	Y	14	A1	-.00001	-.00000	-.00000	.00017	-.00000	.00096	.01602	.00493	.47264	.00529
			TOTAL IN A1		.49471								
			B1	-.00000	.00442	.48503	.01055						
			TOTAL IN B1		.00442								
			E	.00000	0.00000	0.00000	.00197	.41835	0.00000	0.00000	.41748	.46731	0.00000
			TOTAL IN E		.44510								
			TOTAL		.94423								
N2	Z	15	A1	-.00000	-.00000	.00000	.00000	.00006	.00018	.00000	.00142	.00492	.49343
			TOTAL IN A1		.00657								
			E	.00000	0.00000	0.00000	.00000	.00000	0.00000	0.00000	.00012	.02245	0.00000
			TOTAL IN E		.02257								
			TOTAL		.02914								
N2	TOTAL IN A1 ON N2				1.50106								
	TOTAL IN A2 ON N2				.50000								
	TOTAL IN B1 ON N2				1.00000								
	TOTAL IN B2 ON N2				.50000								
	TOTAL IN E ON N2				3.45497								
	TOTAL ON N2				6.95602								

Tableau 11 (suite)

MULLIKEN POPULATION ANALYSIS													
MG(2+)N40,C4V,MG(2+)={33/3}={11/1},N={33/3}={11/1},O={33/3}={11/1},PA59													
				1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
N3	S	16	A1	-.00000	-.00000	.49604	.00000	.00000	.00002	.00379	.00001	.00013	.00000
			TOTAL IN A1		.50000								
			B1	.49585	.00412	.00002	.00000						
			TOTAL IN B1		.49997								
			E	0.00000	.99190	.00000	0.00000	0.00000	.00792	.00005	0.00000	0.00000	.00009
				0.00000	.00004	0.00000	.00000						
			TOTAL IN E		.99996								
			TOTAL		1.99993								
N3	S	17	A1	-.00000	-.00000	.00396	.00009	-.00000	.00317	.47581	.00130	.01546	.00022
			TOTAL IN A1		.49978								
			B1	.00415	.49145	.00425	.00015						
			TOTAL IN B1		.49560								
			E	0.00000	.00810	.00107	0.00000	0.00000	.96959	.00380	0.00000	0.00000	.01139
				0.00000	.00571	0.00000	.00034						
			TOTAL IN E		.99395								
			TOTAL		1.98933								
N3	X	18	A1	-.00001	-.00000	-.00000	.00017	-.00000	.00096	.01602	.00493	.47264	.00529
			TOTAL IN A1		.49471								
			B1	-.00000	.00442	.48503	.01055						
			TOTAL IN B1		.00442								
			E	0.00000	.00000	.00197	0.00000	0.00000	.01835	.01748	0.00000	0.00000	.40731
				0.00000	.54376	0.00000	.01114						
			TOTAL IN E		.44510								
			TOTAL		.94423								
N3	Y	19	A2	.50000									
			TOTAL IN A2		.50000								
			B2	.50000									
			TOTAL IN B2		.50000								
			E	-.00000	0.00000	0.00000	.00006	.00162	0.00000	0.00000	.97720	.01450	0.00000
				.00654	0.00000	.00007	0.00000						
			TOTAL IN E		.99339								
			TOTAL		1.99339								
N3	Z	20	A1	-.00000	-.00000	.00000	.00000	.00006	.00018	.00000	.00142	.00492	.49343
			TOTAL IN A1		.00657								
			E	0.00000	.00000	.00300	0.00000	0.00000	.00000	.00012	0.00000	0.00000	.02245
				0.00000	.00005	0.00300	.97738						
			TOTAL IN E		.02257								
			TOTAL		.02914								
N3	TOTAL IN A1 ON N3			1.50106									
	TOTAL IN A2 ON N3			.50000									
	TOTAL IN B1 ON N3			1.00000									
	TOTAL IN B2 ON N3			.50000									
	TOTAL IN E ON N3			3.45497									
	TOTAL ON N3			6.95602									

Tableau 11 (suite)

MULLIKEN POPULATION ANALYSIS													
MG(2+)N4O,C4V, MG(2+)=(33/3)=[11/11], N=(33/3)=[11/11], O=(33/3)=[11/11], PA59													
				1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
N4	S	21	A1	-.00000	-.00000	.49604	.00000	.00000	.00002	.00379	.00001	.00013	.00000
			TOTAL IN A1		.50000								
			B1	.49585	.00412	.00002	.00000						
			TOTAL IN B1		.49997								
			E	.99190	0.00000	0.00000	.00000	.00792	0.00000	0.00000	.00005	.00009	0.00000
				.00004	0.00000	.00000	0.00000						
			TOTAL IN E		.99996								
			TOTAL		1.99993								
N4	S	22	A1	-.00000	-.00000	.00396	.00009	-.00000	.00317	.47581	.00130	.01546	.00022
			TOTAL IN A1		.49978								
			B1	.00415	.49145	.00425	.00015						
			TOTAL IN B1		.49560								
			E	.00810	0.00000	0.00000	.00107	.96959	0.00000	0.00000	.00380	.01139	0.00000
				.00571	0.00000	.00034	0.00000						
			TOTAL IN E		.99395								
			TOTAL		1.98933								
N4	X	23	A2	.50000									
			TOTAL IN A2		.50000								
			B2	.50000									
			TOTAL IN B2		.50000								
			E	0.00000	-.00000	.00006	0.00000	0.00000	.00162	.97720	0.00000	0.00000	.01450
				0.00000	.00654	0.00000	.00007						
			TOTAL IN E		.99339								
			TOTAL		1.99339								
N4	Y	24	A1	-.00001	-.00000	-.00000	.00017	-.00000	.00096	.01602	.00493	.47264	.00529
			TOTAL IN A1		.49671								
			B1	-.00000	.00442	.48503	.01055						
			TOTAL IN B1		.00442								
			E	.00000	0.00000	0.00000	.00197	.01835	0.00000	0.00000	.00178	.40731	0.00000
				.54376	0.00000	.01114	0.00000						
			TOTAL IN E		.44510								
			TOTAL		.94423								
N4	Z	25	A1	-.00000	-.00000	.00000	.00000	.00006	.00018	.00000	.00142	.00492	.49343
			TOTAL IN A1		.00657								
			E	.00000	0.00000	0.00000	.00000	.00000	0.00000	0.00000	.00012	.02245	0.00000
				.00005	0.00000	.97738	0.00000						
			TOTAL IN E		.02257								
			TOTAL		.02914								
N4	TOTAL IN A1			ON N4	1.50106								
	TOTAL IN A2			ON N4	.50000								
	TOTAL IN B1			ON N4	1.00000								
	TOTAL IN B2			ON N4	.50000								
	TOTAL IN E			ON N4	3.45497								
	TOTAL ON N4				6.95602								

Tableau 11 (suite)

MULLIKEN POPULATION ANALYSIS													
MG(2+)=N40,C4V,MG(2+)= (33/3)= (11/1),N= (33/3)= (11/1),O= (33/3)= (11/1),PA59													
				1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
O	S	26	A1	- .00000	1.98304	.00000	.00000	.00000	.01653	.00016	.00024	.00001	.00001
TOTAL IN A1				1.99999									
O	S	27	A1	- .00000	.01697	- .00000	.00005	.00082	1.93317	.01612	.03223	.00046	.00018
TOTAL IN A1				1.99982									
O	X	28	E	0.00000	- .00000	.00002	0.00000	0.00000	.00201	.00243	0.00000	0.00000	1.08713
				0.00000	.88631	0.00000	.02210						
TOTAL IN E				1.09159									
O	Y	29	E	- .00000	0.00000	0.00000	.00002	.00201	0.00000	0.00000	.00243	1.08713	0.00000
				.88631	0.00000	.02210	0.00000						
TOTAL IN E				1.09159									
O	Z	30	A1	- .00000	.00000	- .00000	.00010	.00151	.03176	.00072	1.93551	.02653	.00366
TOTAL IN A1				1.99614									
O	TOTAL IN A1		ON O	5.99595									
	TOTAL IN A2		ON O	0.00000									
	TOTAL IN B1		ON O	0.00000									
	TOTAL IN B2		ON O	0.00000									
	TOTAL IN E		ON O	2.18318									
	TOTAL ON O			8.17913									
CONSIDER OVERLAPS IN BONDS LESS THAN 7.79700000 AU LONG													

Tableau 12
Analyse de population de recouvrement pour $Mg^{2+}N_4O$.

MG(2+)N4O,C4V,MG(2+)={33/3}={11/1},N={33/3}={11/1},O={33/3}={11/1},PA59 OVERLAP POPULATIONS										
PAGE 1										
1. FROM A1	MOLECULAR ORBITALS									
	N1	N2	N2	N3	N3	N3	N4	N4	N4	N4
	MG(2+)	MG(2+)	N1	MG(2+)	N1	N2	MG(2+)	N1	N2	N3
4A1	.00049	.00049	.00000	.00049	.00000	.00000	.00049	.00000	.00000	.00000
5A1	.00007	.00007	.00000	.00007	.00000	.00000	.00007	.00000	.00000	.00000
6A1	-.00016	-.00016	.00017	-.00016	.00001	.00017	-.00016	.00017	.00001	.00017
7A1	-.00355	-.00355	.01954	-.00355	.00069	.01954	-.00355	.01954	.00069	.01954
8A1	-.00018	-.00018	.00006	-.00018	.00000	.00006	-.00018	.00006	.00000	.00006
9A1	-.00560	-.00560	.01489	-.00560	.00062	.01489	-.00560	.01489	.00062	.01489
TOTAL FROM A1	-.00896	-.00896	.03469	-.00896	.00132	.03469	-.00896	.03469	.00132	.03469
2. FROM A2	MOLECULAR ORBITALS									
	N1	N2	N2	N3	N3	N3	N4	N4	N4	N4
	MG(2+)	MG(2+)	N1	MG(2+)	N1	N2	MG(2+)	N1	N2	N3
1A2	0.00000	0.00000	-.02295	0.00000	-.00006	-.02295	0.00000	-.02295	-.00006	-.02295
TOTAL FROM A2	0.00000	0.00000	-.02295	0.00000	-.00006	-.02295	0.00000	-.02295	-.00006	-.02295
3. FROM B1	MOLECULAR ORBITALS									
	N1	N2	N2	N3	N3	N3	N4	N4	N4	N4
	MG(2+)	MG(2+)	N1	MG(2+)	N1	N2	MG(2+)	N1	N2	N3
2B1	0.00000	0.00000	-.01928	0.00000	.00067	-.01928	0.00000	-.01928	.00067	-.01928
TOTAL FROM B1	0.00000	0.00000	-.01931	0.00000	.00067	-.01931	0.00000	-.01931	.00067	-.01931
4. FROM B2	MOLECULAR ORBITALS									
	N1	N2	N2	N3	N3	N3	N4	N4	N4	N4
	MG(2+)	MG(2+)	N1	MG(2+)	N1	N2	MG(2+)	N1	N2	N3
1B2	0.00000	0.00000	.02102	0.00000	-.00005	.02102	0.00000	.02102	-.00005	.02102
TOTAL FROM B2	0.00000	0.00000	.02102	0.00000	-.00005	.02102	0.00000	.02102	-.00005	.02102
5. FROM E	MOLECULAR ORBITALS									
	N1	N2	N2	N3	N3	N3	N4	N4	N4	N4
	MG(2+)	MG(2+)	N1	MG(2+)	N1	N2	MG(2+)	N1	N2	N3
3E	.00393	.00008	.00001	.00393	-.00000	.00001	.00008	.00001	.00000	.00001
4E	.00008	.00393	.00001	.00008	.00000	.00001	.00393	.00001	-.00000	.00001
5E	-.00003	-.00411	.00096	-.00003	.00000	.00096	-.00411	.00096	-.00136	.00096
6E	-.00411	-.00003	.00096	-.00411	-.00136	.00096	-.00003	.00096	.00000	.00096
7E	-.00018	-.00036	.00135	-.00018	-.00001	.00135	-.00036	.00135	.00011	.00135
8E	-.00036	-.00018	.00135	-.00036	.00011	.00135	-.00018	.00135	-.00001	.00135
9E	.00012	-.00327	-.00239	.00012	.00000	-.00239	-.00327	-.00239	-.00056	-.00239
10E	-.00327	.00012	-.00239	-.00327	-.00056	-.00239	.00012	-.00239	.00000	-.00239
TOTAL FROM E	-.00384	-.00384	-.00014	-.00384	-.00182	-.00014	-.00384	-.00014	-.00182	-.00014
TOTAL FROM ALL	MOLECULAR ORBITALS									
	N1	N2	N2	N3	N3	N3	N4	N4	N4	N4
	MG(2+)	MG(2+)	N1	MG(2+)	N1	N2	MG(2+)	N1	N2	N3
OVERLAP CHARGE	-.01279	-.01279	.01331	-.01279	.00005	.01331	-.01279	.01331	.00005	.01331
DISTANCE (AU)	3.89800	3.89800	5.51260	3.89800	7.79600	5.51260	3.89800	5.51260	7.79600	5.51260

Tableau 12 (suite)

MG(2+)N40,C4V,MG(2+)=(33/3)=[11/1],N=(33/3)=[11/1],O=(33/3)=[11/1],PA59					
OVERLAP POPULATIONS					
PAGE 2					
1. FROM A1	MOLECULAR ORBITALS				
	0	0	0	0	0
	MG(2+)	N1	N2	N3	N4
4A1	.00028	.00000	.00000	.00000	.00000
5A1	.00271	.00000	.00000	.00000	.00000
6A1	-.00396	.00247	.00247	.00247	.00247
7A1	.00026	-.00185	-.00185	-.00185	-.00185
8A1	-.00774	.00201	.00201	.00201	.00201
9A1	.00108	-.00381	-.00381	-.00381	-.00381
TOTAL FROM A1	-.00743	-.00119	-.00119	-.00119	-.00119
2. FROM A2	MOLECULAR ORBITALS				
	0	0	0	0	0
	MG(2+)	N1	N2	N3	N4
TOTAL FROM A2	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
3. FROM B1	MOLECULAR ORBITALS				
	0	0	0	0	0
	MG(2+)	N1	N2	N3	N4
TOTAL FROM B1	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
4. FROM B2	MOLECULAR ORBITALS				
	0	0	0	0	0
	MG(2+)	N1	N2	N3	N4
TOTAL FROM B2	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
5. FROM E	MOLECULAR ORBITALS				
	0	0	0	0	0
	MG(2+)	N1	N2	N3	N4
5E	-.00002	.00001	.00002	.00001	.00002
6E	-.00002	.00002	.00001	.00002	.00001
7E	-.00001	.00006	.00026	.00006	.00026
8E	-.00001	.00026	.00006	.00026	.00006
9E	-.00055	-.00077	.01718	-.00077	.01718
10E	-.00055	.01718	-.00077	.01718	-.00077
TOTAL FROM E	-.00111	.01756	.01756	.01756	.01756
TOTAL FROM ALL MOLECULAR ORBITALS					
	0	0	0	0	0
	MG(2+)	N1	N2	N3	N4
OVERLAP CHARGE	-.00853	.01637	.01637	.01637	.01637
DISTANCE (AU)	3.85100	5.47947	5.47947	5.47947	5.47947

Données pour PA60 du fragment $\text{Mg}^{2+}\text{N}_4\text{O}$ dans une base minimum.[illegible]

10	A1
1	A2
4	B1
1	B2

Tableau 13 (suite)

0.	0.	0.	-.80382454E-02	29	225
0.	0.	0.	0.	29	226
-.71690192E-02	0.	.32095333E-02	-.13767174E-01	29	227
0.	-.74279843E-01	-.69990588E+00	0.	29	228
0.	0.	-.71690192E-02	0.	29	229
-.32095333E-02	.13767174E-01	0.	-.74279843E-01	29	230
.69990588E+00	0.	0.	0.	29	231
.11486192E+00	0.	0.	0.	29	232
30	14E	-.39102750E+00	0.00000		
0.	0.	.80382454E-02	0.	30	233
0.	-.32095333E-02	.13767174E-01	.74279843E-01	30	234
0.	.69990588E+00	0.	0.	30	235
.71690192E-02	0.	0.	.32095333E-02	30	236
-.13767174E-01	.74279843E-01	0.	-.69990588E+00	30	237
0.	0.	.71690192E-02	0.	30	238
0.	0.	0.	-.11486192E+00	30	239
0.	0.	0.	0.	30	240
MG(2+)N40,C4V,MG(2+)=((33/3)=((11/1),N=((33/3)=((11/1),O=((33/3)=((11/1),PA40					
23					
1	1.0				
2	1.0				
3	1.0				
4	1.0				
5	1.0				
6	1.0				
7	1.0				
8	1.0				
9	1.0				
11	1.0				
12	1.0				
13	1.0				
16	1.0				
17	1.0				
18	1.0				
19	1.0				
20	1.0				
21	1.0				
22	1.0				
23	1.0				
24	1.0				
25	1.0				
26	1.0				
5	0	0.0	0.0	3.851	
6	0	0.0	0.0	3.851	
0	0	0	0		

Tableau 14
Moment dipolaire de $\text{Mg}^{2+}\text{N}_4\text{O}$.

DIPOLE MOMENTS CALCULATED WITH REFERENCE TO THE POINT O COORDINATES			
	X	Y	Z
	0.000000	0.000000	3.851000
IN ATOMIC UNITS FOR GLOBAL COORDINATES			
	X	Y	Z
NUCLEAR	0.000000	0.000000	-154.040000
ELECTRON	.000000	.000000	145.802921
TOTAL	.000000	.000000	-8.237079
END PROPERTY ELAPSED TIME = 28.088 SECONDS			
ARGUMENT TOO SMALL, RESULT UNDERFLOW ERROR NUMBER 115 DETECTED BY EXP			
ARGUMENT TOO SMALL, RESULT UNDERFLOW ERROR NUMBER 115 DETECTED BY EXP			
ARGUMENT TOO SMALL, RESULT UNDERFLOW ERROR NUMBER 115 DETECTED BY EXP			
ARGUMENT TOO SMALL, RESULT UNDERFLOW ERROR NUMBER 115 DETECTED BY EXP			
ARGUMENT TOO SMALL, RESULT UNDERFLOW ERROR NUMBER 115 DETECTED BY EXP			
ARGUMENT TOO SMALL, RESULT UNDERFLOW ERROR NUMBER 115 DETECTED BY EXP			
ARGUMENT TOO SMALL, RESULT UNDERFLOW ERROR NUMBER 115 DETECTED BY EXP			
ARGUMENT TOO SMALL, RESULT UNDERFLOW ERROR NUMBER 115 DETECTED BY EXP			
ARGUMENT TOO SMALL, RESULT UNDERFLOW ERROR NUMBER 115 DETECTED BY EXP			
ARGUMENT TOO SMALL, RESULT UNDERFLOW ERROR NUMBER 115 DETECTED BY EXP			

Moments quadrupolaires de $\text{Mg}^{2+}\text{N}_4\text{O}$.

QUADRUPOLE MOMENTS CALCULATED WITH REFERENCE TO THE POINT O COORDINATES							
	X	Y	Z				
	0.000000	0.000000	3.851000				
IN ATOMIC UNITS							
FOR GLOBAL COORDINATES							
	QM(XX)	QM(YY)	QM(ZZ)	QM(XY)	QM(XZ)	QM(YZ)	RSQD
NUCLEAR	-190.243192	-190.243192	380.486384	0.000000	0.000000	0.000000	1018.651352
ELECTRON	174.287800	174.287800	-348.575600	.000000	-.000000	-.000000	*****
TOTAL	-15.955392	-15.955392	31.910784	.000000	-.000000	-.000000	-22.042087

Tableau 16

Données pour PA20A du fragment $\text{Mg}^{2+}\text{N}_4\text{O}$ dans une base de VD.

MG(2+)N4O,C4V,MG(2+)=[12/2/1*],N=[12/2],O=[12/2],PA20A																								
1	2	1																						
MGMLST																								
30	60																							
3	2	2	2	1	1	1	1	1	1	3	2	2	2	3	2	2	2	3	2	2	2	3	2	
2	2	3	2	2	2																			
7	7	0																						
1	1	1	1	1	1	1	1																	
-2	3	-3	2	-2	3	-3																		
-3	-2	2	-3	3	2	-2																		
4	4	4	4	4	4	4	4																	
5	6	6	5	5	6	6																		
6	5	5	6	6	5	5																		
7	7	7	7	7	7	7	7																	
8	-8	-8	-8	-8	-8	-8	-8																	
-9	10	-10	9	-9	10	-10																		
-10	-9	9	-10	10	-9	-9																		
19	15	21	11	19	15	23																		
-20	17	-25	12	-20	17	-25																		
-21	-16	24	-13	21	-16	-24																		
22	18	26	14	22	18	26																		
23	19	11	23	15	11	19																		
-24	21	-13	24	-16	13	-21																		
-25	-20	12	-25	17	-12	-20																		
26	22	14	26	18	14	22																		
11	23	15	19	11	23	15																		
-12	25	-17	20	-12	25	-17																		
-13	-24	16	-21	13	-24	16																		
14	26	18	22	14	26	18																		
15	11	19	15	23	19	11																		
-16	13	-21	16	-24	21	-13																		
-17	-12	20	-17	25	-20	-12																		
18	14	22	18	26	22	14																		
27	27	27	27	27	27	27																		
-28	29	-29	28	-28	29	-29																		
-29	-28	28	-29	29	-28	-28																		
30	30	30	30	30	30	30																		

Tableau 17

Données pour PA30A du fragment $\text{Mg}^{2+}\text{N}_4\text{O}$ dans une base de VD.

MG(2+)N4O,C6V, MG(2+)=(321/21/1*), N=(321/21), O=(321/21), PA30A				
2 0 0	1			
MG(2+)	0.0	0.0	0.0	12.0
N1	3.898	0.0	0.0	7.0
N2	0.0	3.898	0.0	7.0
N3	-3.898	0.0	0.0	7.0
N4	0.0	-3.898	0.0	7.0
O	0.0	0.0	3.851	8.0
96 60				
3 2 1 2 1 2 1 2 1 2 1 1 1 1 1 1 1 3 2 1 2 1 2 1 2 1 3 2 1 2 1 2 1 3 2 1				
MG(2+)	S	654.89097	0.0675674	
MG(2+)	S	98.727577	0.3901195	
MG(2+)	S	21.335201	0.6683850	
MG(2+)	S	28.128657	-0.0863368	
MG(2+)	S	2.2951125	0.5978077	
MG(2+)	S	0.79975294	1.0000000	
MG(2+)	X	23.805108	0.1182192	
MG(2+)	X	5.1165930	0.4748816	
MG(2+)	X	1.2313920	1.0000000	
MG(2+)	Y	4		
MG(2+)	Y	5		
MG(2+)	Z	4		
MG(2+)	Z	5		
MG(2+)	XX	3.444	1.000000	
MG(2+)	YY	10		
MG(2+)	ZZ	10		
MG(2+)	XY	10		
MG(2+)	XZ	10		
MG(2+)	YZ	10		
N1	S	218.36449	0.0678703	
N1	S	32.598890	0.3902018	
N1	S	6.9173900	0.6700832	
N1	S	8.3263800	-0.0808903	
N1	S	0.65919000	0.5672020	
N1	S	0.21009000	1.0000000	
N1	X	6.1203500	0.1159195	
N1	X	1.2593800	0.4699582	
N1	X	0.29145000	1.0000000	
N1	Y	19		
N1	Y	20		
N1	Z	19		
N1	Z	20		
N2	S	16		
N2	S	17		
N2	S	18		
N2	X	19		
N2	X	20		
N2	Y	19		
N2	Y	20		
N2	Z	19		
N2	Z	20		
N3	S	16		
N3	S	17		
N3	S	18		
N3	X	19		
N3	X	20		
N3	Y	19		
N3	Y	20		
N3	Z	19		
N3	Z	20		
N4	S	16		

Données pour PA40 du fragment $\text{Mg}^{2+}\text{N}_4\text{O}$ dans une base de VD.

0	0	2	150	150	0	1	.1	.9
---	---	---	-----	-----	---	---	----	----

Tableau 19
Energies relatives à l'itération 150 pour $Mg^{2+}N_4O$.

MG(2+)N4O,C4V,MG(2+)= (321/21/1*), N=(321/21), O=(321/21), PA40 PA40 CLOSED SHELL HARTREE-FOCK SELF-CONSISTENT-FIELD L.C.A.O. METHOD RESULTS OF ITERATION 150			
	PRESENT ITERATION	PREVIOUS ITERATION	CHANGE
KINETIC ENERGY, T =	481.2299929535	481.2293194278	.0006735257
ONE ELECTRON POTENTIAL ENERGY, V(1) =	-1530.5739656700	-1530.5709988153	-.0029668547
ONE ELECTRON ENERGY, H = T+V(1) =	-1049.3439727165	-1049.3416793875	-.0022933290
TWO ELECTRON POTENTIAL ENERGY, V(1,2) =	362.0996337616	362.0978180976	.0018156641
ELECTRONIC POTENTIAL ENERGY, V(E) = V(1)+V(1,2) =	-1168.4743319083	-1168.4731807177	-.0011511906
ELECTRONIC ENERGY, E(E) = H+V(1,2) =	-687.2443389548	-687.2438612900	-.0004776648
NUCLEAR REPULSION ENERGY, V(N) =	200.1319279364	200.1319279364	
POTENTIAL ENERGY, V = V(E)+V(N) =	-968.3424039719	-968.3412527813	-.0011511906
VIRIAL, -V/T =	2.0122237145	2.0122241387	
TOTAL ENERGY, E = E(E)+V(N) =	-487.1124110184	-487.1119333536	-.0004776648
ORBITAL ENERGIES (VALUES OF PREVIOUS ITERATION IN PARENTHESES)			
1. A1 ORBITALS, (19) (1 - 19)			
-49.42869633 (-49.42891415)	-20.97652522 (-20.97635591)	-16.10423194 (-16.10427128)	-4.41551064 (-4.41569608)
-2.91102427 (-2.91120850)	-1.65983322 (-1.65972392)	-1.49349276 (-1.49351357)	-.96702008 (-.96681416)
-.74925541 (-.74911159)	-.50108852 (-.50129660)	.25888109 (.25888400)	.72598443 (.72600579)
.83908394 (.83902756)	1.00643938 (1.00648087)	1.35163535 (1.35175595)	2.06870382 (2.06857815)
3.84032039 (3.84014561)	6.20596990 (6.20578507)	15.70745634 (15.70726325)	
2. A2 ORBITALS, (2) (20 - 21)			
-.90722726 (-.90726263)	1.07687224 (1.07683644)		
3. B1 ORBITALS, (8) (22 - 29)			
-16.10467658 (-16.10471788)	-1.45447453 (-1.45450298)	-.55417375 (-.55416931)	-.42622327 (-.42629164)
.59640764 (.59637530)	.97855174 (.97850583)	1.06647748 (1.06645246)	6.21230459 (6.21210489)
4. B2 ORBITALS, (3) (30 - 32)			
-.96977911 (-.96981422)	.79220260 (.79216819)	6.19086405 (6.19066443)	
5. F ORBITALS, (28) (33 - 60)			
-16.10441506 (-16.10445439)	-16.10441506 (-16.10445439)	-2.91663678 (-2.91683103)	-2.91663678 (-2.91683103)
-1.47331987 (-1.47334715)	-1.47331987 (-1.47334715)	-.94038608 (-.94041627)	-.94038608 (-.94041627)
-.78199912 (-.78192667)	-.78199912 (-.78192667)	-.54271778 (-.54275355)	-.54271778 (-.54275355)
-.45450458 (-.45458720)	-.45450458 (-.45458720)	.41634162 (.41632072)	.41634162 (.41632072)
.87067839 (.87064080)	.87067839 (.87064080)	.93022305 (.93017586)	.93022305 (.93017586)
1.03421899 (1.03418741)	1.03421899 (1.03418741)	1.41284466 (1.41295628)	1.41284466 (1.41295628)
3.92681432 (3.92662861)	3.92681432 (3.92662861)	6.19405255 (6.19386423)	6.19405255 (6.19386423)
COMPUTED ENERGY ELAPSED TIME = .134 SECONDS			
FINISHED SCF ELAPSED TIME = .002 SECONDS			

Tableau 20

OM de l'itération 150 pour $\text{Mg}^{2+}\text{N}_4\text{O}$.

MG(2+)N4O,C4V,MG(2+)= (321/21/1*),N= (321/21),O= (321/21),PA40										
MOLECULAR ORBITALS										
ITERATION 150										
ROW	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
1A1	-49.4286963	1.00000								
1	-.0829130	-.0832511	-.0151167	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.0000559	-.0000306	-.0144362
	-.0144362	-.0144147	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.0000013	-.0003981	-.0005401	.0002614	-.0005698
	0.0000000	0.0000000	-.0000107	-.0000243	-.0000013	-.0000013	-.0005401	0.0000000	0.0000000	0.0002614
	-.0005698	-.0000107	-.0000243	-.0000013	-.0000013	-.0000013	-.0005401	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	-.0000107	-.0000243	-.0000013	-.0000013	-.0000013	-.0000013	-.0005401	0.0000000	0.0000000	0.0000107
	-.0000243	-.0000013	-.0000013	-.0000013	-.0000013	-.0000013	-.0005401	0.0000000	0.0000000	-.0000107
2A1	-20.9765252	1.00000								
2	-.0000794	-.00002673	.0011640	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.0002704	.0000115	-.0002916
	-.0002916	-.0001439	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.0000121	-.0005459	0.0000000	.0001674	-.0003962
	0.0000000	0.0000000	-.0002371	-.0005760	-.0000121	-.0000121	-.0005459	0.0000000	0.0000000	0.0001674
	-.0003962	-.00002371	-.0005760	-.0000121	-.0000121	-.0000121	-.0005459	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	-.00002371	-.00005760	-.0000121	-.0000121	-.0000121	-.0000121	-.0005459	0.0000000	0.0000000	-.00002371
	-.0005760	.9893288	-.0594190	-.0221170	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.0011335	.0006555
3A1	-16.1042319	1.00000								
3	-.0302166	-.0000141	.0035225	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.0000335	-.0001140	-.0005377
	-.0005377	-.0000454	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.4948572	.0295404	-.0106541	.0002636	-.0004127
	0.0000000	0.0000000	-.0002328	-.0001401	.4948572	.0295404	.0295404	-.0106541	0.0000000	.0002636
	-.0004127	-.0002328	-.0001401	.4948572	.0295404	.0295404	.0295404	-.0106541	0.0000000	0.0000000
	-.0002328	-.0001401	.4948572	.0295404	.0295404	.0295404	.0295404	-.0106541	0.0000000	0.0000000
	-.0001401	.0000336	-.0011387	.0016859	.0000000	.0000000	.0000000	0.0000000	.0004127	.0002328
4A1	-4.4155106	1.00000								
4	-.2684688	.5822322	.4828688	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.0037272	-.0058679	.0024729
	.0024729	.0018629	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.0003300	-.0004083	.0023127	.0001456	-.0022017
	0.0000000	0.0000000	-.0000744	-.000952	-.0003300	-.0004083	.0023127	0.0006000	0.0000000	.0001456
	-.0022017	-.0000744	-.000952	-.0000952	-.0003300	-.0004083	.0023127	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	-.0000952	-.0003069	.0000041	.0015590	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.0002974	-.0015336
5A1	-2.9110243	1.00000								
5	-.0023678	-.0087027	-.0011186	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.5457034	.6016990	.0011677
	.0011677	-.0011644	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.0000034	-.0007889	-.0011484	-.0002132	.0005461
	0.0000000	0.0000000	-.0008525	.0040715	.0000034	.0007889	-.0011484	0.0000000	0.0000000	-.0002132
	.0005461	-.0008525	.0040715	.0000034	.0007889	-.0011484	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	-.0038525	.0040715	.0000034	.0007889	-.0011484	0.0000000	0.0000000	-.0002132	-.0005461	.0000000
	.0040715	-.0002350	-.00064917	.0222706	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.0010750	-.0200675
6A1	-1.6598332	1.00000								
6	-.0059377	.0228693	.0037633	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.0212966	.0187374	.0020544
	.0020544	.0033122	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.0105222	-.0209298	-.0280082	.0034301	.0111061
	0.0000000	0.0000000	-.0039812	.0105222	.0105222	-.0209298	-.0280082	0.0000000	0.0000000	.0034301
	.0111061	-.0039812	-.00085398	.0105222	-.0209298	-.0280082	-.0280082	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	-.0039812	-.00085398	.0105222	-.0209298	-.0280082	-.0280082	-.0280082	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	-.00085398	.2372723	-.5477040	-.5111444	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.0010750	.0000000
7A1	-1.4934928	1.00000								
7	.0117315	-.0025670	-.0169392	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.0018752	.0015065	-.0014778
	-.0014778	-.0039336	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.1146767	.2729433	.2461697	-.0215294	-.0520221
	0.0000000	0.0000000	-.0011315	-.00331148	-.1146767	.2729433	.2461697	0.0000000	0.0000000	-.0215294
	-.0520221	-.0011315	-.00331148	-.1146767	.2729433	.2461697	.2729433	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	-.0011315	-.00331148	-.1146767	.2729433	.2461697	.2729433	.2461697	0.0000000	.0520221	-.0011315

[illegible]

Tableau 20 (suite)

	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.0140064	.0233234	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
8E	-.9403861 1.00000									
40	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.0142396	.0098531	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.0000822	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	-.3803135	-.4293869	0.0000000	0.0000000	-.0138994	.0579181	-.0038617	0.0000000	0.0000000	.0124832
	.0394712	-.0070188	-.0091947	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.3803135	-.4293869
	0.0000000	0.0000000	.0138994	-.0579181	.0038617	0.0000000	0.0000000	.0124832	.0394712	.0070188
	.0091947	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.0140064	-.0233234	0.0000000	0.0000000
9E	-.7819991 1.00000									
41	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.0169621	-.0114703	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.0019072	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	-.0302674	-.0262107	0.0000000	0.0000000	.0108357	-.0555874	.0179314	0.0000000	0.0000000	-.0598058
	-.1078610	.1965595	.2927955	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.0302674	-.0262107
	0.0000000	0.0000000	-.0108357	.0555874	-.0179314	0.0000000	0.0000000	-.0598058	-.1078610	.1965595
	-.2927955	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.3672175	.4976569	0.0000000	0.0000000
10E	-.7819991 1.00000									
42	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.0169621	-.0114703	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.0019072	0.0000000	.0108357	-.0555874	.0179314	-.0598058	-.1078610
	0.0000000	0.0000000	.1965595	.2927955	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.0302674	-.0262107	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.0108357	.0555874	-.0179314	-.0598058	-.1078610	0.0000000	0.0000000
	-.1965595	-.2927955	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.0302674	-.0262107	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.3672175	.4976569	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
11E	-.5427178									
43	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.0053027	.0048994	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.0007408	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	.0020432	.0024586	0.0000000	0.0000000	.0034187	-.0216087	-.0118600	0.0000000	0.0000000	.0640469
	.0774215	-.2627380	-.3494758	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.0020432	.0024586
	0.0000000	0.0000000	-.0034187	.0216087	-.0118600	0.0000000	0.0000000	.0640469	.0774215	-.2627380
	-.3494758	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.3367514	.4242240	0.0000000	0.0000000
12E	-.5427178									
44	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.0053027	.0048994	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.0007408	0.0000000	.0034187	-.0216087	.0118600	.0640469	.0774215
	0.0000000	0.0000000	-.2627380	-.3494758	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.0020432	.0024586	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.0034187	.0216087	-.0118600	.0640469	.0774215	0.0000000	0.0000000
	.2627380	.3494758	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.0020432	.0024586	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.3367514	.4242240	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
13E	-.4545046									
45	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.0567708	-.0401735	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.0005666	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	-.0490798	-.0332239	0.0000000	0.0000000	.0212733	-.0859446	.0043357	0.0000000	0.0000000	-.2856024
	-.4853357	-.0819002	-.1349692	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.0490798	-.0332239
	0.0000000	0.0000000	-.0212733	.0859446	-.0043357	0.0000000	0.0000000	-.2856024	-.4853357	.0819002
	.1349692	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.0406795	-.0446631	0.0000000	0.0000000
14E	-.4545046									
46	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.0567708	-.0401735	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.0005666	0.0000000	.0212733	-.0859446	.0043357	-.2856024	-.4853357
	0.0000000	0.0000000	-.0819002	-.1349692	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.0490798	-.0332239	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.0212733	.0859446	-.0043357	-.2856024	-.4853357	0.0000000	0.0000000
	.0819002	.1349692	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.0490798	-.0332239	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.0406795	-.0446631	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
15E	.4163416									
47	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.0826222	.0236057	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.0000582	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	.1852251	-.0992671	0.0000000	0.0000000	-.0780391	1.0681580	-1.0715435	0.0000000	0.0000000	-.1151556
	.0574950	-.0020663	.0008933	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.1852251	-.0992671
	0.0000000	0.0000000	.0780391	-1.0681580	1.0715435	0.0000000	0.0000000	-.1151556	.0574950	.0020663

Analyse de population de Mulliken pour $\text{Mg}^{2+}\text{N}_4\text{O}$.

MULTI-GEN POPULATION ANALYSIS										
MG(2+) IN 40, 64, 80, 100, 120, 140, 160, 180, 200, 220, 240, 260, 280, 300, 320, 340, 360, 380, 400, 420, 440, 460, 480, 500, 520, 540, 560, 580, 600, 620, 640, 660, 680, 700, 720, 740, 760, 780, 800, 820, 840, 860, 880, 900, 920, 940, 960, 980, 1000, 1020, 1040, 1060, 1080, 1100, 1120, 1140, 1160, 1180, 1200, 1220, 1240, 1260, 1280, 1300, 1320, 1340, 1360, 1380, 1400, 1420, 1440, 1460, 1480, 1500, 1520, 1540, 1560, 1580, 1600, 1620, 1640, 1660, 1680, 1700, 1720, 1740, 1760, 1780, 1800, 1820, 1840, 1860, 1880, 1900, 1920, 1940, 1960, 1980, 2000, 2020, 2040, 2060, 2080, 2100, 2120, 2140, 2160, 2180, 2200, 2220, 2240, 2260, 2280, 2300, 2320, 2340, 2360, 2380, 2400, 2420, 2440, 2460, 2480, 2500, 2520, 2540, 2560, 2580, 2600, 2620, 2640, 2660, 2680, 2700, 2720, 2740, 2760, 2780, 2800, 2820, 2840, 2860, 2880, 2900, 2920, 2940, 2960, 2980, 3000, 3020, 3040, 3060, 3080, 3100, 3120, 3140, 3160, 3180, 3200, 3220, 3240, 3260, 3280, 3300, 3320, 3340, 3360, 3380, 3400, 3420, 3440, 3460, 3480, 3500, 3520, 3540, 3560, 3580, 3600, 3620, 3640, 3660, 3680, 3700, 3720, 3740, 3760, 3780, 3800, 3820, 3840, 3860, 3880, 3900, 3920, 3940, 3960, 3980, 4000, 4020, 4040, 4060, 4080, 4100, 4120, 4140, 4160, 4180, 4200, 4220, 4240, 4260, 4280, 4300, 4320, 4340, 4360, 4380, 4400, 4420, 4440, 4460, 4480, 4500, 4520, 4540, 4560, 4580, 4600, 4620, 4640, 4660, 4680, 4700, 4720, 4740, 4760, 4780, 4800, 4820, 4840, 4860, 4880, 4900, 4920, 4940, 4960, 4980, 5000, 5020, 5040, 5060, 5080, 5100, 5120, 5140, 5160, 5180, 5200, 5220, 5240, 5260, 5280, 5300, 5320, 5340, 5360, 5380, 5400, 5420, 5440, 5460, 5480, 5500, 5520, 5540, 5560, 5580, 5600, 5620, 5640, 5660, 5680, 5700, 5720, 5740, 5760, 5780, 5800, 5820, 5840, 5860, 5880, 5900, 5920, 5940, 5960, 5980, 6000, 6020, 6040, 6060, 6080, 6100, 6120, 6140, 6160, 6180, 6200, 6220, 6240, 6260, 6280, 6300, 6320, 6340, 6360, 6380, 6400, 6420, 6440, 6460, 6480, 6500, 6520, 6540, 6560, 6580, 6600, 6620, 6640, 6660, 6680, 6700, 6720, 6740, 6760, 6780, 6800, 6820, 6840, 6860, 6880, 6900, 6920, 6940, 6960, 6980, 7000, 7020, 7040, 7060, 7080, 7100, 7120, 7140, 7160, 7180, 7200, 7220, 7240, 7260, 7280, 7300, 7320, 7340, 7360, 7380, 7400, 7420, 7440, 7460, 7480, 7500, 7520, 7540, 7560, 7580, 7600, 7620, 7640, 7660, 7680, 7700, 7720, 7740, 7760, 7780, 7800, 7820, 7840, 7860, 7880, 7900, 7920, 7940, 7960, 7980, 8000, 8020, 8040, 8060, 8080, 8100, 8120, 8140, 8160, 8180, 8200, 8220, 8240, 8260, 8280, 8300, 8320, 8340, 8360, 8380, 8400, 8420, 8440, 8460, 8480, 8500, 8520, 8540, 8560, 8580, 8600, 8620, 8640, 8660, 8680, 8700, 8720, 8740, 8760, 8780, 8800, 8820, 8840, 8860, 8880, 8900, 8920, 8940, 8960, 8980, 9000, 9020, 9040, 9060, 9080, 9100, 9120, 9140, 9160, 9180, 9200, 9220, 9240, 9260, 9280, 9300, 9320, 9340, 9360, 9380, 9400, 9420, 9440, 9460, 9480, 9500, 9520, 9540, 9560, 9580, 9600, 9620, 9640, 9660, 9680, 9700, 9720, 9740, 9760, 9780, 9800, 9820, 9840, 9860, 9880, 9900, 9920, 9940, 9960, 9980, 10000, 10020, 10040, 10060, 10080, 10100, 10120, 10140, 10160, 10180, 10200, 10220, 10240, 10260, 10280, 10300, 10320, 10340, 10360, 10380, 10400, 10420, 10440, 10460, 10480, 10500, 10520, 10540, 10560, 10580, 10600, 10620, 10640, 10660, 10680, 10700, 10720, 10740, 10760, 10780, 10800, 10820, 10840, 10860, 10880, 10900, 10920, 10940, 10960, 10980, 11000, 11020, 11040, 11060, 11080, 11100, 11120, 11140, 11160, 11180, 11200, 11220, 11240, 11260, 11280, 11300, 11320, 11340, 11360, 11380, 11400, 11420, 11440, 11460, 11480, 11500, 11520, 11540, 11560, 11580, 11600, 11620, 11640, 11660, 11680, 11700, 11720, 11740, 11760, 11780, 11800, 11820, 11840, 11860, 11880, 11900, 11920, 11940, 11960, 11980, 12000, 12020, 12040, 12060, 12080, 12100, 12120, 12140, 12160, 12180, 12200, 12220, 12240, 12260, 12280, 12300, 12320, 12340, 12360, 12380, 12400, 12420, 12440, 12460, 12480, 12500, 12520, 12540, 12560, 12580, 12600, 12620, 12640, 12660, 12680, 12700, 12720, 12740, 12760, 12780, 12800, 12820, 12840, 12860, 12880, 12900, 12920, 12940, 12960, 12980, 13000, 13020, 13040, 13060, 13080, 13100, 13120, 13140, 1316										

Tableau 21 (suite)

TOTAL ON HC(2+)	9.4800L
-----------------	---------

MULLIKEN POPULATION ANALYSIS											
MG(2+JN40,C48,MG(2+J)=(321/21/1+),N=(321/21),O=(321/21),PA59											
		1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
N1	S	10	AI								
			.00000	.00000	.49440	.00000	.00000	.00003	.00000	.00001	.00019
			.00123	.00016	.00007	.00000	.00001	.00000	.00000	.00000	
			TOTAL IN AI	.49832							
			.49441	.00421	.00000	.00003	.00000	.00004	.00000		
			TOTAL IN BI	.49862							
			.49861	.00000	.00000	.00000	.00009	.00006	.00000	.00000	.00004
			.00000	.00000	.00000	.00014	.00000	.00000	.00018	.00000	.00000
			.00004	.00000	.00000	.00000	.00001	.00000	.00000		
			TOTAL IN E	.49700							
			TOTAL	1.49345							
N1	S	17	AI								
			.00000	.00000	.00754	.00000	.00181	.24543	.00243	.00102	.01863
			.18394	.02504	.01094	.00061	.00192	.00001	.00001	.00001	
			TOTAL IN AI	.25823							
			.27038	.00007	.00294	.21182	.00000	.00763	.00005		
			TOTAL IN BI	.27839							
			.01548	.00000	.00000	.00000	.51787	.00542	.00000	.00000	.00423
			.00000	.00000	.00000	.01350	.40465	.00000	.02789	.00000	.00001
			.00689	.00000	.00000	.00287	.00108	.00000	.00000		
			TOTAL IN E	.54274							
			TOTAL	1.07936							
N1	S	18	AI								
			.00000	.00000	.00194	.00020	.00362	.23255	.00004	.00009	.00158
			.21131	.03437	.01723	.00060	.00262	.00002	.00004	.00006	
			TOTAL IN AI	.23430							
			.22177	.00004	.00134	.27288	.00000	.00627	.00020		
			TOTAL IN BI	.21936							
			.00428	.00000	.00265	.00000	.45573	.00002	.00000	.00000	.00048
			.00000	.00000	.00000	.00000	.49178	.00000	.04365	.00000	.00001
			.00606	.00000	.00000	.00340	.00189	.00000	.00000		
			TOTAL IN E	.45361							
			TOTAL	.90727							
N1	X	19	AI								
			.00000	.00000	.00000	.00000	.00007	.00211	.00065	.01361	.12162
			.02240	.04120	.22931	.01301	.01582	.00000	.00003	.00004	
			TOTAL IN AI	.01643							
			.00000	.00144	.01589	.16785	.00028	.30336	.00013		
			TOTAL IN BI	.00144							
			.00000	.00000	.00000	.00007	.00358	.00085	.00000	.00000	.01360
			.00000	.01309	.00000	.30075	.01985	.00000	.42572	.00000	.00073
			.21622	.00000	.00000	.00794	.00375	.00000	.00000		
			TOTAL IN E	.01795							
			TOTAL	.03582							
N1	X	20	AI								
			.00001	.00000	.00000	.00032	.00078	.00913	.00499	.02610	.30776
			.00052	.01681	.04750	.00852	.01921	.00001	.00012	.00015	
			TOTAL IN AI	.04132							
			.00000	.00211	.02367	.28911	.00000	.18181	.00051		
			TOTAL IN BI	.00211							
			.00000	.00000	.00000	.00403	.01033	.00647	.00000	.00000	.03204
			.00000	.01431	.00000	.59913	.00000	.00000	.20073	.00000	.00000
			.11425	.00000	.00000	.00645	.00653	.00000	.00000	.00000	.00000
			TOTAL IN E	.05287							

Tableau 21 (suite)

N2	Y	30	A1	-.00000	-.00000	.00000	-.00000	-.00000	.00007	.00211	.00065	.01361	.12162
				.05246	.04120	.22931	.01301	.01006	.01582	.00000	.00003	.00004	
			TOTAL IN A1	.01643									
			B1	-.00000	.00144	.01589	.16785	.01104	.00028	.30336	.00013		
			TOTAL IN B1	.00144									
			E	.00000	0.00000	-.00007	0.00000	.00358	0.00000	0.00000	.00085	.01360	0.00000
				.01309	0.00000	.30075	0.00000	.01985	0.00000	.42572	0.00000	.00073	0.00000
				0.00000	.21022	.00794	0.00000	.00375	0.00000	.00000	0.00000		
			TOTAL IN E	.01795									
			TOTAL	.03582									
N2	Y	31	A1	.00001	.00000	.00000	.00032	-.00000	.00078	.00913	.00499	.02610	.30776
				.00052	.01681	.09750	.00852	.00807	.01921	.00001	.00012	.00015	
			TOTAL IN A1	.04132									
			B1	.00000	.00211	.02367	.28911	.00279	-.00000	.18181	.00051		
			TOTAL IN B1	.00211									
			E	-.00000	0.00000	.00403	0.00000	.01033	0.00000	0.00000	.00647	.03204	0.00000
				.01481	0.00000	.59913	0.00000	.00023	0.00000	.20073	0.00000	-.00000	0.00000
				0.00000	.11925	.00645	0.00000	.00653	0.00000	-.00000	0.00000		
			TOTAL IN E	.05287									
			TOTAL	.09631									
N2	Z	32	A1	-.00000	-.00000	.00000	.00000	-.00000	.00007	.00001	.00152	.17131	.01501
				.00022	.08242	.06376	.15744	.00805	.00015	.00005	.00000	.00000	
			TOTAL IN A1	.17290									
			E	.00000	0.00000	.00000	0.00000	.00002	0.00000	0.00000	.00016	.13464	0.00000
				.22912	0.00000	.02441	0.00000	.00001	0.00000	.00071	0.00000	.59391	0.00000
				0.00000	.00177	.01525	0.00000	.00000	0.00000	.00001	0.00000		
			TOTAL IN E	.13482									
			TOTAL	.30774									
N2	Z	33	A1	.00000	.00000	-.00000	.00000	.00012	.00050	.00003	.00508	.27476	.03053
				.00005	.03767	.03121	.11167	.00804	.00020	.00012	.00000	.00000	
			TOTAL IN A1	.28050									
			E	-.00000	0.00000	-.00000	0.00000	.00003	0.00000	0.00000	.00025	.23934	0.00000
				.32456	0.00000	.04786	0.00000	-.00000	0.00000	.00102	0.00000	.37081	0.00000
				0.00000	.00081	.01528	0.00000	.00000	0.00000	.00005	0.00000		
			TOTAL IN E	.23962									
			TOTAL	.52017									
N2			TOTAL IN A1	UN N2	1.50201								
			TOTAL IN A2	UN N2	.50000								
			TOTAL IN B1	UN N2	.93993								
			TOTAL IN B2	UN N2	.49999								
			TOTAL IN E	UN N2	3.42906								
			TOTAL UN N2		6.93105								

Tableau 21 (suite)

MULLIKEN POPULATION ANALYSIS										
PG(2*)N4V,C4V,PG(2*)=(1321/21/10),N=(1321/21),O=(1321/21),PA59										
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
N4 S 43 A1	.00000	.00000	.49440	.00000	-.00000	.00003	.00385	.00003	.00001	.00019
	.00123	.00016	.00007	.00000	.00001	.00001	.00000	.00000	.00000	
TOTAL IN A1		.49832								
01	.49441	.00421	.00000	.00003	.00132	.00000	.00004	.00000		
TOTAL IN B1		.49862								
E	.98801	0.00000	.00000	0.00000	.00809	0.00000	0.00000	.00006	.00004	0.00000
	.00000	0.00000	.00014	0.00000	.00261	0.00000	.00018	0.00000	.00000	0.00000
	0.00000	.00004	.00002	0.00000	.00001	0.00000	.00000	0.00000		
TOTAL IN E		.99700								
TOTAL		1.99395								
N4 S 44 A1	-.00000	-.00000	.00754	-.00000	-.00000	.00181	.24543	.00243	.00102	.01863
	.14354	.02504	.01094	.00061	.00101	.00192	.00001	.00001	.00001	
TOTAL IN A1		.25823								
B1	.00800	.27038	.00007	.00204	.21182	-.00000	.00763	.00005		
TOTAL IN B1		.27839								
E	.01546	0.00000	-.00025	0.00000	.51787	0.00000	0.00000	.00542	.00423	0.00000
	.00044	0.00000	.01350	0.00000	.40465	0.00000	.02789	0.00000	.00001	0.00000
	0.00000	.00060	.00287	0.00000	.00108	0.00000	.00000	0.00000		
TOTAL IN E		.54274								
TOTAL		1.07930								
N4 S 45 A1	.00000	.00000	-.00194	.00020	-.00000	.00362	.23255	-.00004	-.00009	-.00158
	.21131	.03437	.01723	.00060	.00106	.00262	.00002	.00004	.00006	
TOTAL IN A1		.23430								
01	-.00241	.22177	-.00004	.00134	.27288	.00000	.00627	.00020		
TOTAL IN B1		.21936								
E	-.00428	0.00000	.00265	0.00000	.45573	0.00000	0.00000	-.00002	-.00048	0.00000
	.00020	0.00000	-.00060	0.00000	.49178	0.00000	.04365	0.00000	.00001	0.00000
	0.00000	.00000	.00340	0.00000	.00189	0.00000	.00000	0.00000		
TOTAL IN E		.45361								
TOTAL		.40727								
N4 X 46 A2	.24690	.25310								
TOTAL IN A2		.24690								
B2	.21375	.28625	.00001							
TOTAL IN B2		.21375								
E	0.00000	-.00000	0.00000	-.00000	0.00000	.00033	.45172	0.00000	0.00000	.00258
	0.00000	.00001	0.00000	.00522	0.00000	.04806	0.00000	.16101	0.00000	.00167
	.32764	0.00000	0.00000	.00075	0.00000	.00001	0.00000	.00000		
TOTAL IN E		.45463								
TOTAL		.41527								
N4 Y 47 A2	.25310	.24690								
TOTAL IN A2		.25310								
B2	.28625	.21371	.00004							
TOTAL IN B2		.28625								
E	0.00000	.00000	0.00000	.00007	0.00000	.00128	.53361	0.00000	0.00000	.00146
	0.00000	.00000	0.00000	.00122	0.00000	.01772	0.00000	.13110	0.00000	.00143
	.31121	0.00000	0.00000	.00042	0.00000	-.00001	0.00000	-.00000		
TOTAL IN E		.53641								
TOTAL		1.07570								

Tableau 22

Analyse de population de recouvrement pour $\text{Mg}^{2+}\text{N}_4\text{O}$.[illegible]

Tableau 22 (suite)

MG(2+)N40,C4V,MG(2+)=(321/21/1*),N=(321/21),O=(321/21),PA59					
OVERLAP POPULATIONS					
PAGE 2					
1. FROM A1	MOLECULAR ORBITALS				
	U	U	U	U	U
	MG(2+)	N1	N2	N3	N4
4A1	.00042	.00000	.00000	.00000	.00000
5A1	.00099	.00001	.00001	.00001	.00001
6A1	-.00348	.00376	.00376	.00376	.00376
7A1	.00025	-.00222	-.00222	-.00222	-.00222
8A1	-.00473	.00616	.00616	.00616	.00616
9A1	.00030	-.00424	-.00424	-.00424	-.00424
TOTAL FROM A1					
A1	-.00124	.00348	.00348	.00348	.00348
2. FROM A2	MOLECULAR ORBITALS				
	U	U	U	U	U
	MG(2+)	N1	N2	N3	N4
TOTAL FROM A2					
A2	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
3. FROM B1	MOLECULAR ORBITALS				
	U	U	U	U	U
	MG(2+)	N1	N2	N3	N4
TOTAL FROM B1					
B1	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
4. FROM B2	MOLECULAR ORBITALS				
	U	U	U	U	U
	MG(2+)	N1	N2	N3	N4
TOTAL FROM B2					
B2	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
5. FROM E	MOLECULAR ORBITALS				
	U	U	U	U	U
	MG(2+)	N1	N2	N3	N4
5E	-.00002	.00001	.00090	.00001	.00090
6E	-.00002	.00090	.00001	.00090	.00001
7E	-.00001	.00014	.00030	.00014	.00030
8E	-.00001	.00030	.00014	.00030	.00014
9E	-.00024	-.00039	.02906	-.00039	.02906
10E	-.00024	.02906	-.00039	.02906	-.00039
TOTAL FROM E					
E	-.00040	.03003	.03003	.03003	.03003
TOTAL FROM ALL	MOLECULAR ORBITALS				
	U	U	U	U	U
	MG(2+)	N1	N2	N3	N4
OVERLAP CHARGE	-.00170	.03350	.03350	.03350	.03350
DISTANCE (AU)	3.82100	5.47947	5.47947	5.47947	5.47947

Tableau 23
Moment dipolaire de $\text{Mg}^{2+}\text{N}_4\text{O}$.

DIPOLE MOMENTS
CALCULATED
WITH REFERENCE TO
THE POINT
O
COORDINATES

X	Y	Z
0.000000	0.000000	3.851000

IN ATOMIC UNITS
FOR GLOBAL COORDINATES

	X	Y	Z
NUCLEAR	0.000000	0.000000	-154.840000
ELECTRON	.000000	.000000	145.541292
TOTAL	.000000	.000000	-8.498708

END PROPERTY ELAPSED TIME = 32.199 SECONDS

ARGUMENT TOO SMALL, RESULT UNDERFLOW
ERROR NUMBER 115 DETECTED BY EXP

ARGUMENT TOO SMALL, RESULT UNDERFLOW
ERROR NUMBER 115 DETECTED BY EXP

ARGUMENT TOO SMALL, RESULT UNDERFLOW
ERROR NUMBER 115 DETECTED BY EXP

ARGUMENT TOO SMALL, RESULT UNDERFLOW
ERROR NUMBER 115 DETECTED BY EXP

ARGUMENT TOO SMALL, RESULT UNDERFLOW
ERROR NUMBER 115 DETECTED BY EXP

ARGUMENT TOO SMALL, RESULT UNDERFLOW
ERROR NUMBER 115 DETECTED BY EXP

ARGUMENT TOO SMALL, RESULT UNDERFLOW
ERROR NUMBER 115 DETECTED BY EXP

ARGUMENT TOO SMALL, RESULT UNDERFLOW
ERROR NUMBER 115 DETECTED BY EXP

ARGUMENT TOO SMALL, RESULT UNDERFLOW
ERROR NUMBER 115 DETECTED BY EXP

ARGUMENT TOO SMALL, RESULT UNDERFLOW
ERROR NUMBER 115 DETECTED BY EXP

ARGUMENT TOO SMALL, RESULT UNDERFLOW
ERROR NUMBER 115 DETECTED BY EXP

ARGUMENT TOO SMALL, RESULT UNDERFLOW
ERROR NUMBER 115 DETECTED BY EXP

Tableau 24
Energies relatives à l'itération 150 pour $Mg^{2+}N_4O$.

MG(2+)N4O,C4V,MG(2+)=(321/21/1*),N=(321/21),O=(321/21),PA40
PA40 CLOSED SHELL HARTREE-FOCK SELF-CONSISTENT-FIELD L.C.A.O. METHOD
RESULTS OF ITERATION 150

	PRESENT ITERATION	PREVIOUS ITERATION	CHANGE
KINETIC ENERGY, T =	481.3025218195	481.3024121040	.0001197155
ONE ELECTRON POTENTIAL ENERGY, V(1) =	-1522.0068319869	-1522.0063134791	-.0005185078
ONE ELECTRON ENERGY, H = T+V(1) =	-1040.7043101674	-1040.7039013750	-.0004087923
TWO ELECTRON POTENTIAL ENERGY, V(1,2) =	357.8667152966	357.8663835186	.0003317780
ELECTRONIC POTENTIAL ENERGY, V(E) = V(1)+V(1,2) =	-1164.1401166903	-1164.1399299604	-.0001867299
ELECTRONIC ENERGY, E(E) = H+V(1,2) =	-682.8375948708	-682.8375178564	-.0000770144
NUCLEAR REPULSION ENERGY, V(N) =	195.7893028476	195.7893028476	
POTENTIAL ENERGY, V = V(E)+V(N) =	-968.3508138427	-968.3506271128	-.0001867299
VIRIAL, -V/T =	2.0119379599	2.0119380306	
TOTAL ENERGY, E = E(E)+V(N) =	-487.0482920231	-487.0482150088	-.0000770144
ORBITAL ENERGIES (VALUES OF PREVIOUS ITERATION IN PARENTHESES)			
1. A1 ORBITALS, (19) (1 - 19)			
-49.43420688 (-49.43424349)	-20.95768968 (-20.95761388)	-16.10181358 (-16.10183611)	-4.41995303 (-4.41998433)
-2.91599868 (-2.91602731)	-1.64930867 (-1.64926517)	-1.49262482 (-1.49283860)	-.95495039 (-.95488427)
-.75003755 (-.75004060)	-.50615358 (-.50617310)	.26276057 (.26275233)	.73656248 (.73657799)
.84120629 (.84118656)	.94967497 (.94968005)	1.32876456 (1.32881369)	2.06455382 (2.06453291)
3.84310530 (3.84307975)	6.19912413 (6.19909510)	15.69602244 (15.69598974)	
2. A2 ORBITALS, (2) (20 - 21)			
-.90556755 (-.90558245)	1.07777403 (1.07775872)		
3. B1 ORBITALS, (8) (22 - 29)			
-16.10228055 (-16.10230308)	-1.45240873 (-1.45242256)	-.55534352 (-.55532264)	-.42375662 (-.42379839)
.59677198 (.59676026)	.97668028 (.97666936)	1.07194874 (1.07193272)	0.20448675 (0.20445678)
4. B2 ORBITALS, (3) (30 - 32)			
-.96824900 (-.96826310)	.79361164 (.79379678)	6.18611181 (6.18607612)	
5. E ORBITALS, (28) (33 - 60)			
-16.10200849 (-16.10203102)	-16.10200849 (-16.10203102)	-2.92088171 (-2.92091540)	-2.92088171 (-2.92091540)
-1.47139609 (-1.47140937)	-1.47139609 (-1.47140937)	-.93864294 (-.93865816)	-.93864294 (-.93865816)
-.75739029 (-.75735439)	-.75739029 (-.75735439)	-.56065727 (-.56067628)	-.56065727 (-.56067628)
-.45517486 (-.45519961)	-.45517486 (-.45519961)	.41542802 (.41541754)	.41542802 (.41541754)
.87201702 (.87200062)	.87201702 (.87200062)	.93461146 (.93459990)	.93461146 (.93459990)
1.03734069 (1.03732503)	1.03734069 (1.03732503)	1.39003638 (1.390008156)	1.39003638 (1.390008156)
3.90403525 (3.90400173)	3.90403525 (3.90400173)	6.18990791 (6.18987769)	6.18990791 (6.18987769)

COMPUTED ENERGY ELAPSED TIME = .138 SECONDS

FINISHED SCF ELAPSED TIME = .002 SECONDS

Tableau 25
OM de l'itération 150 pour $\text{Mg}^{2+}\text{N}_4\text{O}$.

$\text{MG}(2+)\text{N}_4\text{O}, \text{C4V}, \text{MG}(2+) = (321/21/1^*), \text{N} = (321/21), \text{O} = (321/21), \text{PA40}$
MOLECULAR ORBITALS
ITERATION 150

ROW	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
1A1	-49.4342069	1.00000								
1	-.9829095	-.0891360	.0150751	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.0000665	-.0000098	-.0144450
	.0144450	.0144301	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.0000005	-.0003891	-.0005226	-.0002485	-.0005367
	0.0000000	0.0000000	.0000411	-.0000895	.0000005	.0003891	-.0005226	0.0000000	0.0000000	-.0002485
	.0005367	.0000411	-.0000895	.0000005	.0003891	-.0005226	.0002485	-.0005367	0.0000000	0.0000000
	.0000411	-.0000895	.0000005	.0003891	-.0005226	0.0000000	0.0000000	.0002485	-.0005367	.0000411
	-.0000895	-.0000021	.0003513	-.0004646	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.0002111	.0004653
2A1	-20.9576897	1.00000								
2	.0001011	.0003388	-.0014925	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.0002786	-.0008373	.0003509
	.0003509	.0002205	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.0000000	.0003933	-.0003961	-.0000678	.0001508
	0.0000000	0.0000000	.0001324	-.0003233	.0000050	.0003033	-.0003961	0.0000000	0.0000000	-.0000678
	.0001508	.0001324	-.0003233	.0000050	.0003033	-.0003961	.0000678	-.0001508	0.0000000	0.0000000
	.0001324	-.0003233	.0000050	.0003033	-.0003961	0.0000000	0.0000000	.0001508	-.0000678	.0001324
	-.0003233	-.0893130	-.0593109	.0218715	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.0011683	-.0005365
3A1	-16.1018136	1.00000								
3	.0002123	.0007869	-.0034054	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.0000839	.0002934	.0005392
	.0005392	.0006274	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.4948554	-.0294755	.0105548	-.0003460	.0005039
	0.0000000	0.0000000	-.0000733	.0000791	-.4948554	-.0294755	.0105548	0.0000000	0.0000000	-.0003460
	.0005039	-.0000733	.0000791	-.4948554	-.0294755	.0105548	.0003460	-.0005039	0.0000000	0.0000000
	-.0000733	.0000791	-.4948554	-.0294755	.0105548	0.0000000	0.0000000	.0003460	-.0005039	-.0000733
	.0000791	-.0000214	.0006342	-.0009075	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.0001837	.0004812
4A1	-4.4199530	1.00000								
4	-.2684797	.5822733	.4829062	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.0036556	-.0066588	.0024577
	.0024577	.0019057	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.0002987	-.0005070	.0022949	-.0002206	-.0021517
	0.0000000	0.0000000	-.0000070	.0003308	-.0002987	-.0005070	.0022949	0.0000000	0.0000000	.0002206
	-.0021517	-.0000070	.0003308	-.0002987	-.0005070	.0022949	-.0002206	.0021517	0.0000000	0.0000000
	-.0000070	.0003308	-.0002987	-.0005070	.0022949	0.0000000	0.0000000	-.0002206	.0021517	-.0000070
	.0003308	-.0002984	-.0001964	.0018556	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.0002433	-.0017105
5A1	-2.9159987	1.00000								
5	-.0025329	.0085373	.0004995	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.5456157	.6015075	.0009787
	.0009787	-.0011843	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.0003499	.0013551	-.0038155	-.0000313	.0000784
	0.0000000	0.0000000	-.0007766	.0033982	.0003499	.0013551	-.0038155	0.0000000	0.0000000	-.0000313
	.00040784	-.0007766	.0033982	.0003499	.0013551	-.0038155	.0000313	-.00040784	0.0000000	0.0000000
	-.0007766	.0033982	.0003499	.0013551	-.0038155	0.0000000	0.0000000	.00040784	-.0000000	-.0007766
	.0033982	-.0002326	-.0068776	.0227002	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.0011608	-.0203013
6A1	-1.6493087	1.00000								
6	.0054532	-.0216295	-.0021212	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.0207642	-.0180143	-.0021221
	-.0021221	-.0002322	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.00070130	.0132160	.0198054	-.0013150	-.0066272
	0.0000000	0.0000000	.0029194	.0075367	-.0070130	.0132160	.0198054	0.0000000	0.0000000	-.0013150
	-.0066272	.0029194	.0075367	-.0070130	.0132160	.0198054	.0013150	.0066272	0.0000000	0.0000000
	.0029194	.0075367	-.0070130	.0132160	.0198054	0.0000000	0.0000000	.0013150	.0066272	.0029194
	.0075367	-.2380744	.5464293	.5172912	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.0492069	-.0923642
7A1	-1.4928248	1.00000								
7	.0111161	-.0406918	-.0148396	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.0089289	.0082874	-.0015803
	-.0015803	-.0036823	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.1149359	.2728309	.2476954	-.0212488	-.0519759
	0.0000000	0.0000000	.0012569	.0040964	-.1149359	.2728309	.2476954	0.0000000	0.0000000	-.0212488
	-.0519759	.0012569	.0040964	-.1149359	.2728309	.2476954	.0212488	.0519759	0.0000000	0.0000000
	.0012569	.0040964	-.1149359	.2728309	.2476954	0.0000000	0.0000000	.0212488	.0519759	.0012569

Tableau 25 (suite)

	.0040964	.0192485	-.0491395	-.0354838	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.0026257	-.0040421
8A1	-.9549504	1.000000								
8	-.0085886	.0467488	-.0176031	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.0320886	.0196008	.0059660
	.0059660	.0014882	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.0059247	.0278429	-.0064449	.0036174	.0205496
	0.0000000	0.0000000	-.0126958	-.0295070	-.0059247	.0278429	-.0064449	0.0000000	0.0000000	.0036174
	.0205496	-.0126958	-.0295070	-.0059247	.0278429	-.0064449	-.0036174	-.0205496	0.0000000	0.0000000
	-.0126958	-.0295070	-.0059247	.0278429	-.0064449	0.0000000	0.0000000	-.0036174	-.0205496	-.0126958
	-.0295070	-.0353380	.1373889	-.0009620	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.9135629	.6268518
9A1	-.7500375	1.000000								
9	.0012451	-.0059969	.0004226	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.0112522	-.0049020	.0001142
	.0001142	-.0016638	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.0005091	.0027610	-.0011707	.0151548	.0239197
	0.0000000	0.0000000	.2343375	.3339102	-.0005091	.0027610	-.0011707	0.0000000	0.0000000	.0151548
	.0239197	.2343375	.3339102	-.0005091	.0027610	-.0011707	0.0000000	-.0151548	-.0239197	.0000000
	.2343375	.3339102	-.0005091	.0027610	-.0011707	0.0000000	0.0000000	-.0151548	-.0239197	.2343375
	.3339102	.0069315	-.0379472	.0165219	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.565318	.0476291
10A1	-.5061536									
10	.0203265	-.1099659	.0303879	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.0169590	.0106867	-.0032866
	-.0082866	-.0139470	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.0254831	-.1182639	.0253299	-.1833028	-.3524955
	0.0000000	0.0000000	.0127802	.0228245	.0254831	-.1182639	.0253299	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	-.3524955	.0127802	.0228245	.0254831	-.1182639	.0253299	.1833028	.3524955	0.0000000	0.0000000
	.0127802	.0228245	.0254831	-.1182639	.0253299	0.0000000	0.0000000	.1833028	.3524955	.0127802
	.0228245	.0054103	-.0330857	.0179007	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.0558671	.0412668
11A1	.2627606									
11	-.0264898	.2298507	-.1749447	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.0178037	-.0031829	.0259742
	.0259742	.0308373	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.0557367	.6872005	-.6559945	-.1712459	.0312915
	0.0000000	0.0000000	.0191547	-.0058475	-.0557367	.6872005	-.6559945	0.0000000	0.0000000	-.1712459
	.0312915	.0191547	-.0058475	-.0557367	.6872005	-.6559945	.1712459	-.0312915	0.0000000	0.0000000
	.0191547	-.0058475	-.0557367	.6872005	-.6559945	0.0000000	0.0000000	.1712459	-.0312915	.0191547
	-.0058475	-.0249160	.2410934	-.2096921	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.1029537	.0236261
12A1	.7365625									
12	-.0137398	.1867298	-.2112956	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.0667674	-.0023543	.0261025
	.0281025	.0200479	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.0166590	-.2529102	.2631323	-.1536247	.1682090
	0.0000000	0.0000000	.2254854	-.1701696	.0166590	-.2529102	.2631323	0.0000000	0.0000000	-.1536247
	.1682090	.2254854	-.1701696	.0166590	-.2529102	.2631323	.1536247	-.1682090	0.0000000	0.0000000
	.2254854	-.1701696	.0166590	-.2529102	.2631323	0.0000000	0.0000000	.1536247	-.1682090	.2254854
	-.1701696	-.0994313	1.2057843	-1.1938113	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.0051628	.1411274
13A1	.8412063									
13	-.0163420	.2205383	-.2434183	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.0440399	.0043315	.0262084
	.0262084	.0354169	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.0128090	-.2053512	.2187911	-.4597590	.3587725
	0.0000000	0.0000000	-.1503977	.1263445	.0128090	-.2053512	.2187911	0.0000000	0.0000000	-.4597590
	.3587725	-.1503977	.1263445	.0128090	-.2053512	.2187911	.4597590	-.3587725	0.0000000	0.0000000
	-.1503977	.1263445	.0128090	-.2053512	.2187911	0.0000000	0.0000000	.4597590	-.3587725	-.1503977
	.1263445	.0372614	-.4666639	.4678955	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.0097106	-.0163382
14A1	.9496750									
14	.0036296	-.0456302	.0465294	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.0134457	.0007113	-.0018909
	-.0018909	.0133966	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.0015646	-.0232164	.0242139	.0577224	-.0480464
	0.0000000	0.0000000	-.4428876	.4000248	.0015646	-.0232164	.0242139	0.0000000	0.0000000	.0577224
	-.0480464	-.4428876	.4000248	.0015646	-.0232164	.0242139	-.0577224	.0480464	0.0000000	0.0000000
	-.4428876	.4000248	.0015646	-.0232164	.0242139	0.0000000	0.0000000	-.0577224	.0480464	-.4428876
	.4000248	-.0650484	.8460173	-.8627970	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.0273933	-.0124109
15A1	1.3287646									
15	.0102000	-.2047553	.2666326	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.0778414	.0232182	-.0341230
	-.0341230	-.0155181	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.0028301	.0504559	-.0547128	-.0736242	.0776017
	0.0000000	0.0000000	.0674444	-.0730725	-.0028301	.0504559	-.0547128	0.0000000	0.0000000	-.0736242
	.0776017	.0674444	-.0730725	-.0028301	.0504559	-.0547128	.0736242	-.0776017	0.0000000	0.0000000
	.0674444	-.0730725	-.0028301	.0504559	-.0547128	0.0000000	0.0000000	.0736242	-.0776017	.0674444

Tableau 25 (suite)

	-0.0730725	-0.0171097	.2485206	-.2603163	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.9620784	-.9034112
16A1	2.0645538									
16	.0532608	-1.4004795	1.8877823	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.0305390	-.0202976	-.1719023
	-.1719023	-.1683918	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.0046853	.1150947	-.1344250	-.1463662	.1936168
	0.0000000	0.0000000	.0194783	-.0264492	-.0046853	.1150947	-.1344250	0.0000000	0.0000000	-.1463662
	.1936168	.0194783	-.0264492	-.0046853	.1150947	-.1344250	.1463662	-.1936168	0.0000000	0.0000000
	.0194783	-.0264492	-.0046853	.1150947	-.1344250	0.0000000	0.0000000	.1463662	-.1936168	.0194783
	-.0264492	-.0072759	.1259266	-.1417234	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.2117064	.2539878
17A1	3.8431053									
17	-.0007306	.0263456	-.0345403	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	1.0224537	-1.0055389	-.0033652
	-.0033652	.0139752	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.0006617	.0177871	-.0210682	-.0153027	.0237785
	0.0000000	0.0000000	-.0090043	.0137518	.0006617	.0177871	-.0210682	0.0000000	0.0000000	-.0153027
	.0237785	-.0090043	.0137518	-.0006617	.0177871	-.0210682	.0153027	-.0237785	0.0000000	0.0000000
	-.0090043	.0137518	-.0006617	.0177871	-.0210682	0.0000000	0.0000000	.0153027	-.0237785	-.0090043
	.0137518	.0054808	-.1150617	.1355946	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.0959190	-.1442285
18A1	6.1991241									
18	.0004900	-.0091837	.0106343	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.0104200	-.0152788	.5005365
	.5005365	-.9995413	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.0003002	.0087999	-.0105281	-.0074650	.0124848
	0.0000000	0.0000000	.0034355	-.0058791	-.0003002	.0087999	-.0105281	0.0000000	0.0000000	-.0074650
	.0124848	.0034355	-.0058791	-.0003002	.0087999	-.0105281	.0074650	-.0124848	0.0000000	0.0000000
	.0034355	-.0058791	-.0003002	.0087999	-.0105281	0.0000000	0.0000000	.0074650	-.0124848	.0034355
	-.0058791	.0011731	-.0261362	.0310857	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.0193448	-.0319469
19A1	15.6960224									
19	.5157336	-2.6591489	-.9100515	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.0000000	-.0000000	1.5591629
	1.5591629	1.5617001	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.0003204	-.0287743	.0379171	.0202368	-.0002717
	0.0000000	0.0000000	-.0032985	.0066655	.0003204	-.0287743	.0379171	0.0000000	0.0000000	.0002368
	-.0002717	-.0032985	.0066655	.0003204	-.0287743	.0379171	-.0202368	.0402717	0.0000000	0.0000000
	-.0032985	.0066655	.0003204	-.0287743	.0379171	0.0000000	0.0000000	-.0202368	.0402717	-.0032985
	.0066655	.0006735	-.0274357	.0353121	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.0104412	-.0366257
1A2	-.9055675	1.000000								
20	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	-.2836450	-.3065637	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.2836450	.3065637	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.2836450	.3065637
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.2836450	-.3065637	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
2A2	1.0777740									
21	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	-.5120439	.5377899	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.5120439	-.5377899	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.5120439	-.5377899
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.5120439	.5377899	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
181	-16.1022806	1.000000								
22	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	.0001428	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.4948620	-.0133144	.0133144	.0002367	-.0001428
	0.0000000	0.0000000	-.0000474	-.0000126	.4948620	.0133144	-.0133144	0.0000000	0.0000000	-.0002367
	.0010048	.0000474	-.0000126	-.4948620	.0133144	-.0133144	.0002367	-.0000000	0.0000000	.0001428
	-.0000474	.0000126	.4948620	.0133144	-.0133144	0.0000000	0.0000000	.0002367	-.0000000	.0000474
	-.0000126	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
281	-1.4524087	1.000000								
23	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	.0021180	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.1199818	-.2908866	-.2526235	.0184866	.0431275
	0.0000000	0.0000000	-.0023921	-.0056110	-.1199818	.2908866	.2526235	0.0000000	0.0000000	-.0184866
	-.0431275	.0023921	.0056110	.1199818	-.2908866	-.2526235	-.0184866	-.0431275	0.0000000	0.0000000
	-.0023921	-.0056110	-.1199818	.2908866	.2526235	0.0000000	0.0000000	.0184866	.0431275	.0023921

Tableau 25 (suite)

		.0056110	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
381		-.5553435								
24	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0012757	
	-0.0012757	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.0021191	-.0105570	.0030477	.0008836	-.0056120
	0.0000000	0.0000000	.2443384	.3343495	-.0021191	.0105570	-.0030477	.0008836	.0000000	-.0008836
	.0056120	-.2443384	-.3343495	.0021191	-.0105570	.0030477	-.0008836	.0056120	0.0000000	0.0000000
	.2443384	.3343495	-.0021191	.0105570	-.0030477	0.0000000	0.0000000	.0008836	-.0056120	-.2443384
	-.3343495	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.0000000	0.0000000	0.0000000
481		-.4237568								
25	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.0058523
	.0058523	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.0088435	.0250489	.0122431	.2266296	.3599325
	0.0000000	0.0000000	.0046989	.0008543	.0088435	-.0250489	-.0122431	0.0000000	0.0000000	-.2266296
	-.3599325	-.0046989	-.0008543	-.0088435	.0250489	.0122431	-.2266296	-.3599325	0.0000000	0.0000000
	.0046989	.0008543	.0088435	-.0250489	-.0122431	0.0000000	0.0000000	.2266296	.3599325	-.0046989
	-.0008543	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
581		.5967720								
26	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.0084849
	.0084849	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.0540303	.8276120	-.8697611	.0876464	-.0309159
	0.0000000	0.0000000	.0147357	-.0100465	.0540303	-.8276120	.8697611	0.0000000	0.0000000	-.0876464
	.0309159	-.0147357	.0100465	-.0540303	.8276120	-.8697611	-.0876464	.0309159	0.0000000	0.0000000
	.0147357	-.0100465	.0540303	-.8276120	.8697611	0.0000000	0.0000000	.0876464	-.0309159	-.0147357
	.0100465	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
681		.9766803								
27	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.0047729
	.0047729	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.0002735	-.0018091	.0008682	-.0547732	.0480475
	0.0000000	0.0000000	.5214717	-.4776315	-.0002735	.0018091	-.0008682	.0547732	0.0000000	-.0547732
	-.0480475	-.5214717	.4776315	.0002735	-.0018091	.0008682	-.0547732	-.0480475	0.0000000	0.0000000
	.5214717	-.4776315	-.0002735	.0018091	-.0008682	0.0000000	0.0000000	-.0547732	.0480475	-.5214717
	.4776315	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
781		1.0719437								
28	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.0188276
	.0188276	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.0090144	.1943612	-.2245813	-.5306920	.5065081
	0.0000000	0.0000000	-.0491436	.0484987	.0090144	-.1943612	.2245813	0.0000000	0.0000000	.5306920
	-.5065081	.0491436	-.0484987	-.0090144	.1943612	-.2245813	.5306920	-.5065081	0.0000000	0.0000000
	-.0491436	.0484987	.0090144	-.1943612	.2245813	0.0000000	0.0000000	-.5306920	.5065081	-.0491436
	-.0484987	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
881		6.2044868								
29	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.8662953
	-.8662953	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.0007509	.0276986	-.0346906	-.0186951	.0326839
	0.0000000	0.0000000	.0032474	-.0054717	.0007509	-.0276986	.0346906	0.0000000	0.0000000	-.0186951
	-.0326839	-.0032474	.0054717	-.0007509	.0276986	-.0346906	.0186951	-.0326839	0.0000000	0.0000000
	.0032474	-.0054717	.0007509	-.0276986	.0346906	0.0000000	0.0000000	-.0186951	.0326839	-.0032474
	.0054717	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
182		-.9682490	1.000000							
30	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	-.0020152	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	-.2586326	-.3061181	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.2586326	-.3061181	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.2586326	.3061181	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
282		.7938116								
31	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	-.0055746	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	.5068952	-.4463024	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.5068952	-.4463024	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.5068952	.4463024	0.0000000	0.0000000	0.0000000

10

	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
3B2	6.1861118									
32	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	-1.0000127	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	-0.0044170	0.0073150	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-0.0044170	0.0073150	0.0000000	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0044170	-0.0073150	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0044170	-0.0073150	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
1E	-16.1020085	1.000000								
33	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	0.0004836	-0.0012106	0.0000000	0.0000000	-0.0000000	-0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	-0.0001516	-0.0000805	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	-0.0000500	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
2E	-16.1020085	1.000000								
34	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	-0.0000805	0.0000500	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
3E	-2.9208817	1.000000								
35	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	-0.0000854	0.0018676	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	-0.0219747	-0.0000803	0.0041888	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	0.0021806	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	-0.0041888	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
4E	-2.9208817	1.000000								
36	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	-0.0000803	0.0041888	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
5E	-1.4713961	1.000000								
37	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	-0.0000803	0.0041888	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
6E	-1.4713961	1.000000								
38	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	-0.0000803	0.0041888	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
7E	-0.9386429	1.000000								
39	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	-0.0000803	0.0041888	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000

Tableau 25 (suite)

	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-0.0056924	-0.0103673	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
8E	-0.9386429	1.000000								
40	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0128679	0.0085863	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0003222	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	-0.3803211	-0.4304915	0.0000000	0.0000000	-0.0136303	0.0566273	-0.0035641	0.0000000	0.0000000	0.0109186
	0.0372097	0.0013987	0.0009960	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-0.3803211	-0.4304915
	0.0000000	0.0000000	0.0136300	-0.0566273	0.0035641	0.0000000	0.0000000	0.0109186	0.372097	-0.0013987
	-0.0009960	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-0.0056924	-0.0103673	0.0000000	0.0000000
9E	-0.7573903	1.000000								
41	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0132699	0.0077105	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-0.0016169	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	0.0076198	0.0061822	0.0000000	0.0000000	-0.0068554	0.0364607	-0.0132911	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	0.0173640	-0.2118599	-0.3102805	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	0.0068554	-0.0364607	0.0132911	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	0.3102805	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-0.3735458	-0.5029619	0.0000000	0.0000000
10E	-0.7573903	1.000000								
42	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0132699	0.0077105	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-0.0016169	0.0000000	-0.0068554	0.0364607	-0.0132911	0.0000000	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	-0.2118599	-0.3102805	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0068554	-0.0364607	0.0132911	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	0.2118599	0.3102805	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0076198	0.0061822	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-0.3735458	-0.5029619	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
11E	-0.5606573									
43	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0003862	-0.0005382	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0005450	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	0.0102147	0.0079988	0.0000000	0.0000000	-0.0034185	0.0201983	-0.0097015	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	0.0396479	0.2648631	0.3580258	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	0.0034185	-0.0201983	0.0097015	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	-0.3580258	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-0.3281493	-0.4216032	0.0000000	0.0000000
12E	-0.5606573									
44	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0003862	-0.0005382	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0005450	0.0000000	-0.0034185	0.0201983	-0.0097015	0.0000000	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	0.2648631	0.3580258	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0102147	0.0079988	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0034185	-0.0201983	0.0097015	0.0099899	0.0396479	0.0000000	0.0000000
	-0.2648631	-0.3580258	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0102147	0.0079988	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-0.3281493	-0.4216032	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
13E	-0.4551749									
45	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0550168	0.0374844	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0017866	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	0.0517757	0.0351576	0.0000000	0.0000000	-0.0217721	0.0890378	-0.0059353	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	0.5036585	-0.0120817	-0.0215030	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0517757	0.0351576
	0.0000000	0.0000000	0.0217721	-0.0890378	0.0059353	0.0000000	0.0000000	0.2950652	0.5036585	0.0120817
	0.0215030	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0453896	0.0484759	0.0000000	0.0000000
14E	-0.4551749									
46	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0550168	0.0374844	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0017866	0.0000000	-0.0217721	0.0890378	-0.0059353	0.0000000	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	-0.0120817	-0.0215030	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0517757	0.0351576	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0217721	-0.0890378	0.0059353	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	0.0120817	0.0215030	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0517757	0.0351576	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0453896	0.0484759	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
15E	-0.4154230									
47	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0794920	0.0206435	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.022672	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-0.0784678	1.0726544	-1.0746658	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000

Tableau 25 (suite)

MOLECULAR ORBITALS PUNCHED

Tableau 26
Analyse de population de Mulliken pour $\text{Mg}^{2+}\text{N}_4\text{O}$.

MULLIKEN POPULATION ANALYSIS												
MG(2+)N4O.G4V, MG(2+)= (321/21/1°), N= (321/21), O= (321/21), PA59												
			1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
MG(2+) S	1	A1	1.96364 .00029	-.00000 .00010	-.00000 .00014	.02084 .00001	.00000 .00007	.00001 .00230	.00004 .00000	.00003 .00000	.00000 .01238	.00014
TOTAL IN A1			1.98456									
MG(2+) S	2	A1	.05067 .03388	-.00000 .01729	-.00000 .02365	1.07564 .00101	.00015 .01651	.00060 .62010	.00220 .06013	.00209 .00002	.00004 .14480	.01120
TOTAL IN A1			1.13140									
MG(2+) S	3	A1	-.00637 .03082	.00000 .02402	-.00000 .03191	.89159 .00127	.00001 .02703	-.00005 1.06241	-.00075 .00040	.00084 .00001	.00000 -.06656	.00342
TOTAL IN A1			.08528									
MG(2+) X	4	E	0.00000 0.00000	-.00000 0.00000	0.00000 0.00000	.92652 .00679	0.00000 0.00000	.00277 .01183	.00038 0.00000	0.00000 .00704	0.00000 0.00000	.00039 .00078
TOTAL IN E			.93006									
MG(2+) X	5	E	0.00000 0.00000	-.00000 -.00000	0.00000 0.00000	1.06209 -.00152	0.00000 0.00000	.00005 -.00170	-.00005 0.00000	0.00000 .00028	0.00000 0.00000	-.00006 .00004
TOTAL IN E			1.06202									
MG(2+) Y	6	E	-.00000 0.00000	0.00000 0.00000	.92652 .00679	0.00000 0.00000	.00277 .01183	0.00000 0.00000	0.00000 .00704	.00038 0.00000	.00039 .00078	0.00000 0.00000
TOTAL IN E			.93006									
MG(2+) Y	7	E	-.00000 -.00000	0.00000 0.00000	1.06209 -.00152	0.00000 0.00000	.00005 -.00170	0.00000 0.00000	0.00000 .00028	-.00005 0.00000	-.00006 .00004	0.00000 0.00000
TOTAL IN E			1.06202									
MG(2+) Z	8	A1	.00000 .00012	-.00000 .00628	-.00000 .00321	.00005 .00031	.93162 .00915	.00111 .00119	.00021 1.04342	.00236 .00007	.00027 .00000	.00064
TOTAL IN A1			.93562									
MG(2+) Z	9	A1	-.00000 -.00002	-.00000 .00015	-.00000 .00019	.00011 -.00001	1.06281 .00189	.00010 .00051	.00001 .93426	-.00032 .00018	-.00003 .00000	-.00012
TOTAL IN A1			1.06269									
MG(2+) XX	10	A1	-.00266 .00183	-.00000 .00145	-.00000 .00104	.00346 -.00000	.00001 .00167	.00004 .02433	.00005 .00003	.00020 .33337	-.00000 .63474	.00043
TOTAL IN A1			.00111									
MG(2+) YY	11	A1	-.00266 .00183	-.00000 .00145	-.00000 .00104	.00346 -.00000	.00001 .00167	.00004 .02433	.00005 .00003	.00020 .33337	-.00000 .63474	.00043
TOTAL IN A1			.00111									
MG(2+) TOTAL IN A1	ON MG(2+)		6.00195									
TOTAL IN A2	ON MG(2+)		0.00000									
TOTAL IN B1	ON MG(2+)		.00005									
TOTAL IN B2	ON MG(2+)		.00003									
TOTAL IN E	ON MG(2+)		3.98421									
TOTAL ON MG(2+)	TOTAL ON MG(2+)		9.98624									

Tableau 26 (suite)

MULLIKEN POPULATION ANALYSIS													
HG(2+)N40,C4V,HG(2+)= (321/21/1*),N= (321/21),O= (321/21),PA59													
				1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
N1	S	16	A1	.00000	.00000	.49440	.00000	.00000	.00001	.00387	.00001	.00000	.00021
				.00127	.00012	.00000	.00000	.00000	.00001	.00000	.00000	.00000	
			TOTAL IN A1		.49830								
			B1	.49440	.00421	.00000	.00002	.00132	.00006	.00064	.00000		
			TOTAL IN B1		.49862								
			E	0.00000	.98881	0.00000	.00000	0.00000	.00810	.00006	0.00000	0.00000	.00001
				0.00000	.00000	0.00000	.00015	0.00000	.00263	0.00000	.00018	0.00000	.00000
				.00004	0.00000	0.00000	.00001	0.00000	.00001	0.00000	.00000		
			TOTAL IN E		.99698								
			TOTAL		1.99390								
N1	S	17	A1	-.00000	-.00000	.00752	-.00000	-.00001	.00075	.24599	.00114	.00001	.02080
				.19037	.01904	.01172	.00015	.00057	.00190	.00003	.00000	.00001	
			TOTAL IN A1		.25541								
			B1	.00800	.27005	.00016	.00185	.21184	.00000	.00805	.00004		
			TOTAL IN B1		.27805								
			E	0.00000	.01545	0.00000	-.00022	0.00000	.51756	.00519	0.00000	0.00000	.00176
				0.00000	.00046	0.00000	.01428	0.00000	.46889	0.00000	.02709	0.00000	.00001
				.00736	0.00000	0.00000	.00114	0.00000	.00103	0.00000	.00000		
			TOTAL IN E		.53974								
			TOTAL		1.07319								
N1	S	18	A1	.00000	.00000	-.00193	.00019	.00006	.00163	.23546	-.00004	.00000	-.00179
				.21865	.02606	.01831	.00010	.00062	.00255	.00005	.00002	.00006	
			TOTAL IN A1		.23537								
			B1	-.00241	.22218	-.00003	.00148	.27164	.00001	.00697	.00017		
			TOTAL IN B1		.21977								
			E	0.00000	-.00426	0.00000	.00235	0.00000	.45769	-.00001	0.00000	0.00000	-.00023
				0.00000	-.00001	0.00000	-.00082	0.00000	.49385	0.00000	.04217	0.00000	.00004
				.00668	0.00000	0.00000	.00140	0.00000	.00175	0.00000	.00001		
			TOTAL IN E		.45493								
			TOTAL		.91008								
N1	X	19	A1	-.00000	-.00000	.00000	-.00000	-.00000	.00001	.00207	.00010	.00082	.13215
				.05192	.03075	.25805	.00389	.00517	.01490	.00011	.00002	.00004	
			TOTAL IN A1		.00301								
			B1	-.00000	.00142	-.00000	.18297	.01186	.00341	.30024	.00011		
			TOTAL IN B1		.00142								
			E	0.00000	.00000	0.00000	-.00006	0.00000	.00346	.00058	0.00000	0.00000	.00001
				0.00000	.00171	0.00000	.32170	0.00000	.01985	0.00000	.42919	0.00000	.00004
				.21787	0.00000	0.00000	.00229	0.00000	.00326	0.00000	.00001		
			TOTAL IN E		.00409								
			TOTAL		.00851								
N1	X	20	A1	.00001	.00000	.00000	.00028	.00012	.00024	.00929	.00147	.00167	.33907
				.00039	.01097	.11231	.00172	.00397	.01806	.00020	.00008	.00014	
			TOTAL IN A1		.01308								
			B1	.00000	.00204	.00005	.31354	.00289	.00156	.17350	.00042		
			TOTAL IN B1		.00204								
			E	0.00000	-.00000	0.00000	.00343	0.00000	.01011	.00586	0.00000	0.00000	.00078
				0.00000	.00432	0.00000	.64617	0.00000	.00020	0.00000	.19848	0.00000	-.00001
				.12310	0.00000	0.00000	.00176	0.00000	.00575	0.00000	.00005		
			TOTAL IN E		.02018								
			TOTAL		.03530								

Tableau 26 (suite)

N1	Y	21	A2	.24642	.25358															
				TOTAL IN A2	.24642															
			B2	.21329	.28671	.00001														
				TOTAL IN B2	.21329															
			E	-.00000	0.00000	-.00000	0.00000	.00033	0.00000	0.00000	.45214	.00016	0.00000							
				.00028	0.00000	.00693	0.00000	.04800	0.00000	.16453	0.00000	.00215	0.00000							
				0.00000	.32514	.00032	0.00000	.00001	0.00000	.00000	0.00000									
				TOTAL IN E	.45263															
				TOTAL	.91234															
N1	Y	22	A2	.25358	.24642															
				TOTAL IN A2	.25358															
			B2	.28671	.21326	.00003														
				TOTAL IN B2	.28671															
			E	.00000	0.00000	.00006	0.00000	.00130	0.00000	0.00000	.53568	.00008	0.00000							
				.00013	0.00000	.00138	0.00000	.01746	0.00000	.13343	0.00000	.00187	0.00000							
				0.00000	.30824	.00039	0.00000	-.00001	0.00000	-.00000	0.00000									
				TOTAL IN E	.53711															
				TOTAL	1.07740															
N1	Z	23	A1	-.00000	-.00000	.00000	-.00000	-.00000	.00004	.00001	.00070	.18770	.00062							
				.00062	.06328	.02630	.21623	.00422	.00026	.00004	.00000	.00000								
				TOTAL IN A1	.18845															
			E	0.00000	.00000	0.00000	-.00000	0.00000	.00005	.00001	0.00000	0.00000	.15514							
				0.00000	.23449	0.00000	.00055	0.00000	.00028	0.00000	.00044	0.00000	.60123							
				.00199	0.00000	0.00000	.00571	0.00000	.00012	0.00000	.00000									
				TOTAL IN E	.15519															
				TOTAL	.34366															
N1	Z	24	A1	.00000	.00000	-.00000	.00001	.00008	.00029	.00003	.00277	.30573	.00133							
				.00001	.02819	.01497	.14215	.00403	.00030	.00010	.00002	.00000								
				TOTAL IN A1	.30890															
			E	0.00000	-.00000	0.00000	.00012	0.00000	.00014	.00000	0.00000	0.00000	.26326							
				0.00000	.34521	0.00000	.00111	0.00000	-.00000	0.00000	.00017	0.00000	.38233							
				.00170	0.00000	0.00000	.00566	0.00000	.00024	0.00000	.00002									
				TOTAL IN E	.26355															
				TOTAL	.57253															
N1	TOTAL IN A1		ON N1	1.50252																
	TOTAL IN A2		ON N1	.50600																
	TOTAL IN B1		ON N1	.99999																
	TOTAL IN B2		ON N1	.49999																
	TOTAL IN E		ON N1	3.42440																
	TOTAL		ON N1	6.92690																

Tableau 26 (suite)

MULLIKEN POPULATION ANALYSIS													
MG(2+)N40,C4V,MG(2+)= (321/21/1*), N= (321/21), O= (321/21), PA59													
				1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
N2	S	25	A1	.00000	.00000	.49440	.00000	.00000	.00001	.00387	.00001	.00000	.00021
				.00127	.00012	.00008	.00000	.00000	.00001	.00000	.00000	.00000	
			TOTAL IN A1		.49830								
			B1	.49440	.00421	.00000	.00002	.00132	.00000	.00004	.00000		
			TOTAL IN B1		.49862								
			E	.98881	0.00000	.00000	0.00000	.00810	0.00000	0.00000	.00006	.00001	0.00000
				.00000	0.00000	.00015	0.00000	.00263	0.00000	.00018	0.00000	.00000	0.00000
				0.00000	.00004	.00001	0.00000	.00001	0.00000	.00000	0.00000		
			TOTAL IN E		.99698								
			TOTAL		1.99390								
N2	S	26	A1	-.00000	-.00000	.00752	-.00000	-.00001	.00075	.24599	.00114	.00001	.02080
				.19037	.01904	.01172	.00015	.00057	.00190	.00003	.00000	.00001	
			TOTAL IN A1		.25541								
			B1	.00800	.27005	.00016	.00185	.21184	.00000	.00805	.00004		
			TOTAL IN B1		.27805								
			E	.01545	0.00000	-.00022	0.00000	.51756	0.00000	0.00000	.00519	.00176	0.00000
				.00046	0.00000	.01428	0.00000	.40889	0.00000	.02709	0.00000	.00001	0.00000
				0.00000	.00736	.00114	0.00000	.00103	0.00000	.00000	0.00000		
			TOTAL IN E		.53974								
			TOTAL		1.07319								
N2	S	27	A1	.00000	.00000	-.00193	.00019	.00006	.00163	.23546	-.00004	.00000	-.00179
				.21865	.02606	.01831	.00010	.00062	.00255	.00005	.00002	.00006	
			TOTAL IN A1		.23537								
			B1	-.00241	.22218	-.00003	.00148	.27164	.00001	.00697	.00017		
			TOTAL IN B1		.21977								
			E	-.00426	0.00000	.00235	0.00000	.45709	0.00000	0.00000	-.00001	-.00023	0.00000
				-.00001	0.00000	-.00082	0.00000	.49385	0.00000	.04217	0.00000	.00004	0.00000
				0.00000	.00668	.00140	0.00000	.00175	0.00000	.00001	0.00000		
			TOTAL IN E		.45493								
			TOTAL		.91008								
N2	X	28	A2	.24642	.25358								
			TOTAL IN A2		.24642								
			B2	.21329	.28671	.00001							
			TOTAL IN B2		.21329								
			E	0.00000	-.00000	0.00000	-.00000	0.00000	.00033	.45214	0.00000	0.00000	.00016
				0.00000	.00028	0.00000	.00693	0.00000	.04800	0.00000	.16453	0.00000	.00215
				.32514	0.00000	0.00000	.00032	0.00000	.00001	0.00000	.00000		
			TOTAL IN E		.45263								
			TOTAL		.91234								
N2	X	29	A2	.25358	.24642								
			TOTAL IN A2		.25358								
			B2	.28671	.21326	.00003							
			TOTAL IN B2		.28671								
			E	0.00000	0.00000	0.00000	.00006	0.00000	.00130	.53568	0.00000	0.00000	.00008
				0.00000	.00013	0.00000	.00138	0.00000	.01746	0.00000	.13343	0.00000	.00187
				.30824	0.00000	0.00000	.00039	0.00000	-.00001	0.00000	-.00000		
			TOTAL IN E		.53711								
			TOTAL		1.07740								
N2	Y	30	A1	-.00000	-.00000	.00000	-.00000	-.00000	.00001	.00207	.00010	.00002	.13215

Tableau 26 (suite)

				.05192	.03075	.25805	.00389	.00517	.01490	.00011	.00002	.00004
				TOTAL IN A1	.00301							
		B1		-.00000	.00142	-.00000	.16297	.01186	.00341	.30024	.00011	
				TOTAL IN B1	.00142							
		E		.00000	0.00000	-.00006	0.00000	.00346	0.00000	0.00000	.00068	.00001
				.00171	0.00000	.32170	0.00000	.01985	0.00000	.42919	0.00000	0.00000
				0.00000	.21787	.00229	0.00000	.00326	0.00000	.00001	0.00000	
				TOTAL IN E	.00409							
				TOTAL	.00851							
N2	Y	31	A1	.00001	.00000	.00000	.00028	.00012	.00024	.00029	.00147	.00167
				.00039	.01097	.11231	.00172	.00397	.01806	.00020	.00008	.00014
				TOTAL IN A1	.01308							
		B1		.00000	.00204	.00005	.31354	.00289	.00150	.17950	.00042	
				TOTAL IN B1	.00204							
		E		-.00000	0.00000	.00343	0.00000	.01011	0.00000	0.00000	.00586	.00078
				.00432	0.00000	.64617	0.00000	.00020	0.00000	.19848	0.00000	-.00001
				0.00000	.12310	.00176	0.00000	.00575	0.00000	.00005	0.00000	0.00000
				TOTAL IN E	.02018							
				TOTAL	.03530							
N2	Z	32	A1	-.00000	-.00000	.00000	-.00000	-.00000	.00004	.00001	.00070	.18770
				.00062	.06328	.02630	.21623	.00422	.00026	.00004	.00000	.00000
				TOTAL IN A1	.18845							
		E		.00000	0.00000	-.00000	0.00000	.00005	0.00000	0.00000	.00001	.15514
				.23449	0.00000	.00055	0.00000	.00028	0.00000	.00044	0.00000	.60123
				0.00000	.00199	.00571	0.00000	.00012	0.00000	.00000	0.00000	0.00000
				TOTAL IN E	.15519							
				TOTAL	.34366							
N2	Z	33	A1	.00000	.00000	-.00000	.00001	.00008	.00029	.00003	.00277	.30573
				.00001	.02819	.01497	.14215	.00403	.00030	.00010	.00002	.00000
				TOTAL IN A1	.30890							
		E		-.00000	0.00000	.00012	0.00000	.00014	0.00000	0.00000	.00000	.26328
				.34521	0.00000	.00111	0.00000	-.00000	0.00000	.00017	0.00000	.38233
				0.00000	.00170	.00566	0.00000	.00024	0.00000	.00002	0.00000	0.00000
				TOTAL IN E	.26355							
				TOTAL	.57253							
N2	TOTAL IN A1			ON N2	1.50252							
	TOTAL IN A2			ON N2	.50000							
	TOTAL IN B1			ON N2	.99999							
	TOTAL IN B2			ON N2	.49999							
	TOTAL IN E			ON N2	3.42440							
	TOTAL			ON N2	6.92690							

Tableau 26 (suite)

MULLIKEN POPULATION ANALYSIS													
HG(2+)N40,C4V,HG(2+)=((321/21/1*),N=((321/21),Q=((321/21),PA59													
				1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
N3	S	34	A1	.00000	.00000	.49440	.00000	.00000	.00001	.00387	.00001	.00000	.00021
				.00127	.00012	.00000	.00000	.00000	.00001	.00000	.00000	.00000	
			TOTAL IN A1			.49830							
			B1	.49440	.00421	.00000	.00002	.00132	.00000	.00004	.00000		
			TOTAL IN B1			.49862							
			E	.00000	.98881	.00000	.00000	.00000	.00810	.00006	.00000	.00000	.00001
				.00000	.00000	.00000	.00015	.00000	.00263	.00000	.00018	.00000	.00000
				.00004	.00000	.00000	.00001	.00000	.00001	.00000	.00000		
			TOTAL IN E			.99698							
			TOTAL			1.99390							
N3	S	35	A1	-.00000	-.00000	.00752	-.00000	-.00001	.00075	.24599	.00114	.00001	.02080
				.19037	.01904	.01172	.00015	.00057	.00190	.00003	.00000	.00001	
			TOTAL IN A1			.25541							
			B1	.00800	.27005	.00016	.00185	.21184	.00000	.00805	.00004		
			TOTAL IN B1			.27805							
			E	.00000	.01545	.00000	-.00022	.00000	.51756	.00519	.00000	.00000	.00176
				.00000	.00046	.00000	.01428	.00000	.40889	.00000	.02709	.00000	.00001
				.00736	.00000	.00000	.00114	.00000	.00103	.00000	.00000		
			TOTAL IN E			.53974							
			TOTAL			1.07319							
N3	S	36	A1	.00000	.00000	-.00193	.00019	.00006	.00163	.23546	-.00004	.00000	-.00179
				.21865	.02606	.01831	.00010	.00062	.00255	.00005	.00002	.00006	
			TOTAL IN A1			.23537							
			B1	-.00241	.22218	-.00003	.00148	.27164	.00001	.00097	.00017		
			TOTAL IN B1			.21977							
			E	.00000	-.00426	.00000	.00235	.00000	.45709	-.00001	.00000	.00000	-.00023
				.00000	-.00001	.00000	-.00082	.00000	.49385	.00000	.00217	.00000	.00004
				.00668	.00000	.00000	.00140	.00000	.00175	.00000	.00001		
			TOTAL IN E			.45493							
			TOTAL			.91008							
N3	X	37	A1	-.00000	-.00000	.00000	-.00000	-.00000	.00001	.00267	.00010	.00082	.13215
				.05192	.03075	.25805	.00389	.00517	.01490	.00011	.00002	.00004	
			TOTAL IN A1			.06301							
			B1	-.00000	.00142	-.00000	.18297	.01186	.00341	.30024	.00011		
			TOTAL IN B1			.00142							
			E	.00000	.00000	.00000	-.00006	.00000	.00346	.00058	.00000	.00000	.00001
				.00000	.00171	.00000	.32170	.00000	.01965	.00000	.42919	.00000	.00004
				.21787	.00000	.00000	.00229	.00000	.00326	.00000	.00001		
			TOTAL IN E			.00409							
			TOTAL			.00851							
N3	X	38	A1	.00001	.00000	.00000	.00028	.00012	.00024	.00929	.00147	.00167	.33907
				.00039	.01097	.11231	.00172	.00397	.01806	.00020	.00008	.00014	
			TOTAL IN A1			.01308							
			B1	.00000	.00204	.00005	.31354	.00289	.00156	.17950	.00042		
			TOTAL IN B1			.00204							
			E	.00000	-.00000	.00000	.00343	.00000	.01011	.00586	.00000	.00000	.00078
				.00000	.00432	.00000	.64617	.00000	.00020	.00000	.19848	.00000	-.00001
				.12310	.00000	.00000	.00176	.00000	.00575	.00000	.00005		
			TOTAL IN E			.02018							
			TOTAL			.03530							

Tableau 26 (suite)

MULLIKEN POPULATION ANALYSIS													
MG(2+1)N40,C4W,MG(2+1)=(321/21/1*),N=(321/21),O=(321/21),PA59													
				1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
N4	S	43	A1	.00000	.00000	.49440	.00000	.00000	.00001	.00387	.00001	.00000	.00021
				.00127	.00012	.00008	.00000	.00000	.00001	.00000	.00000	.00000	
			TOTAL IN A1			.49830							
			B1	.49440	.00421	.00000	.00002	.00132	.00000	.00004	.00000		
			TOTAL IN B1			.49862							
			E	.98881	0.00000	.00000	0.00000	.00010	0.00000	0.00000	.00006	.00001	0.00000
				.00000	0.00000	.00015	0.00000	.00263	0.00000	.00018	0.00000	.00000	0.00000
				0.00000	.00004	.00001	0.00000	.00001	0.00000	.00000	0.00000		
			TOTAL IN E			.99698							
			TOTAL			1.99390							
N4	S	44	A1	-.00000	-.00000	.00752	-.00000	-.00001	.00075	.24599	.00114	.00001	.02080
				.19037	.01904	.01172	.00015	.00057	.00190	.00003	.00000	.00001	
			TOTAL IN A1			.25541							
			B1	.00800	.27005	.00016	.00185	.21184	.00000	.00005	.00004		
			TOTAL IN B1			.27805							
			E	.01545	0.00000	-.00022	0.00000	.51756	0.00000	0.00000	.00519	.00176	0.00000
				.00046	0.00000	.01428	0.00000	.40889	0.00000	.02769	0.00000	.00001	0.00000
				0.00000	.00736	.00114	0.00000	.00103	0.00000	.00000	0.00000		
			TOTAL IN E			.53974							
			TOTAL			1.07319							
N4	S	45	A1	.00000	.00000	-.00193	.00019	.00006	.00163	.23546	-.00004	.00000	-.00179
				.21865	.02606	.01831	.00010	.00062	.00255	.00005	.00002	.00006	
			TOTAL IN A1			.23537							
			B1	-.00241	.22218	-.00003	.00148	.27164	.00001	.00697	.00017		
			TOTAL IN B1			.21977							
			E	-.00426	0.00000	.00235	0.00000	.45709	0.00000	0.00000	-.00001	-.00023	0.00000
				-.00001	0.00000	-.00082	0.00000	.49385	0.00000	.04217	0.00000	.00004	0.00000
				0.00000	.00668	.00140	0.00000	.00175	0.00000	.00001	0.00000		
			TOTAL IN E			.45493							
			TOTAL			.91008							
N4	X	46	A2	.24642	.25358								
			TOTAL IN A2			.24642							
			B2	.21329	.28671	.00001							
			TOTAL IN B2			.21329							
			E	0.00000	-.00000	0.00000	-.00000	0.00000	.00033	.45214	0.00000	0.00000	.00016
				0.00000	.00028	0.00000	.00693	0.00000	.04800	0.00000	.16453	0.00000	.00215
				.32514	0.00000	0.00000	.00032	0.00000	.00001	0.00000	.00000		
			TOTAL IN E			.45263							
			TOTAL			.91234							
N4	X	47	A2	.25358	.24642								
			TOTAL IN A2			.25358							
			B2	.28671	.21326	.00003							
			TOTAL IN B2			.28671							
			E	0.00000	.00000	0.00000	.00006	0.00000	.00130	.53558	0.00000	0.00000	.00008
				0.00000	.00013	0.00000	.00138	0.00000	.01746	0.00000	.13343	0.00000	.00187
				.30824	0.00000	0.00000	.00039	0.00000	-.00001	0.00000	-.00000		
			TOTAL IN E			.53711							
			TOTAL			1.07740							
N4	Y	48	A1	-.00000	-.00000	.00000	-.00000	-.00000	.00001	.00207	.00010	.00002	.13215

Tableau 26 (suite)

				.05192	.03075	.25805	.00389	.00517	.01490	.00011	.00002	.00004
				TOTAL IN A1	.00301							
		B1		-.00000	.00142	-.00000	.18297	.01186	.00341	.30024	.00011	
				TOTAL IN B1	.00142							
		E		.00000	0.00000	-.00006	0.00000	.00346	0.00000	0.00000	.00068	.00001
				.00171	0.00000	.32170	0.00000	.01985	0.00000	.42919	0.00000	0.00000
				0.00000	.21787	.00229	0.00000	.00326	0.00000	.00001	0.00000	
				TOTAL IN E	.00409							
				TOTAL	.00851							
N4	Y	49	A1	.00001	.00000	.00000	.00028	.00012	.00024	.00929	.00147	.00167
				.00039	.01097	.11231	.00172	.00397	.01866	.00020	.00000	.00014
				TOTAL IN A1	.01308							
		B1		.00000	.00204	.00005	.31354	.00289	.00156	.17950	.00042	
				TOTAL IN B1	.00204							
		E		-.00000	0.00000	.00343	0.00000	.01011	0.00000	0.00000	.00586	.00078
				.00432	0.00000	.64617	0.00000	.00020	0.00000	.19848	0.00000	-.00001
				0.00000	.12310	.00176	0.00000	.00575	0.00000	.60005	0.00000	
				TOTAL IN E	.02018							
				TOTAL	.03530							
N4	Z	50	A1	-.00000	-.00000	.00000	-.00000	-.00000	.00004	.00001	.00070	.18770
				.00062	.06328	.02630	.21623	.00422	.00026	.00004	.00000	.00000
				TOTAL IN A1	.18845							
		E		.00000	0.00000	-.00000	0.00000	.00005	0.00000	0.00000	.00001	.15514
				.23449	0.00000	.00055	0.00000	.00028	0.00000	.00004	0.00000	.60123
				0.00000	.00199	.00571	0.00000	.00612	0.00000	.00000	0.00000	
				TOTAL IN E	.15519							
				TOTAL	.34366							
N4	Z	51	A1	.00000	.00000	-.00000	.00001	.00008	.00029	.00003	.00277	.30573
				.00001	.02819	.01497	.14215	.00403	.00030	.00010	.00002	.00000
				TOTAL IN A1	.30890							
		E		-.00000	0.00000	.00012	0.00000	.00014	0.00000	0.00000	.00000	.26328
				.34521	0.00000	.08111	0.00000	-.00000	0.00000	.00017	0.00000	.38233
				0.00000	.00170	.00566	0.00000	.00024	0.00000	.00002	0.00000	
				TOTAL IN E	.26355							
				TOTAL	.57253							
N4	TOTAL IN A1			ON N4	1.50252							
	TOTAL IN A2			ON N4	.50000							
	TOTAL IN B1			ON N4	.99999							
	TOTAL IN B2			ON N4	.49999							
	TOTAL IN E			ON N4	3.42440							
	TOTAL ON N4				6.92690							

Tableau 26 (suite)

MULLIKEN POPULATION ANALYSIS													
MG(2+)N40,C4W,MG(2+)= (321/21/1*), N=(321/21), O=(321/21), PA59													
				1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
O	S	52	A1	-.00000	1.97682	.00000	.00000	.00000	.01630	.00011	.00034	.00002	.00001
				.00023	.00384	.00054	.00166	.00010	.00002	.00001	.00000	.00000	
			TOTAL IN A1		1.99358								
O	S	53	A1	-.00000	.03115	-.00000	-.00000	-.00016	.99075	.00700	.03529	.00164	.00103
				.03033	.55549	.07894	.24546	.01803	.00323	.00174	.00007	.00002	
			TOTAL IN A1		1.06566								
O	S	54	A1	.00000	-.06797	.00000	.00010	.00189	.94851	.00386	-.00019	.00021	.00049
				.02555	.60418	.09005	.29101	.03575	.00367	.00265	.00019	.00005	
			TOTAL IN A1		.94640								
O	X	55	E	0.00000	-.00000	0.00000	-.00000	0.00000	.00023	.00012	0.00000	0.00000	.45976
				0.00000	.34802	0.00000	.00620	0.00000	.00737	0.00000	.00098	0.00000	.01748
				.00503	0.00000	0.00000	1.15480	0.00000	.00001	0.00000	.00001		
			TOTAL IN E		.46011								
O	X	56	E	0.00000	.00000	0.00000	.00005	0.00000	.00068	.00034	0.00000	0.00000	.69791
				0.00000	.47877	0.00000	.00561	0.00000	.00014	0.00000	.00034	0.00000	.00633
				.00203	0.00000	0.00000	.80772	0.00000	.00003	0.00000	.00003		
			TOTAL IN E		.69898								
O	Y	57	E	-.00000	0.00000	-.00000	0.00000	.00023	0.00000	0.00000	.00012	.45976	0.00000
				.34802	0.00000	.00620	0.00000	.00737	0.00000	.00098	0.00000	.01748	0.00000
				0.00000	.00503	1.15480	0.00000	.00001	0.00000	.00001	0.00000		
			TOTAL IN E		.46011								
O	Y	58	E	.00000	0.00000	.00005	0.00000	.00068	0.00000	0.00000	.00034	.69791	0.00000
				.47877	0.00000	.00561	0.00000	.00014	0.00000	.00034	0.00000	.00633	0.00000
				0.00000	.00203	.80772	0.00000	.00003	0.00000	.00003	0.00000		
			TOTAL IN E		.69898								
O	Z	59	A1	-.00000	.00000	-.00000	.00000	-.00002	.00922	.00003	.63679	.00890	.00836
				.01839	.05641	.00009	.00112	1.01698	.63836	.00523	.00016	.00005	
			TOTAL IN A1		.85492								
O	Z	60	A1	.00000	-.00000	-.00000	.00016	.00271	.02146	.00020	1.09771	.00517	.00335
				.00106	.01515	-.00014	.00081	.79687	.04542	.00941	.00054	.00014	
			TOTAL IN A1		1.12741								
O	TOTAL IN A1			ON O	5.98797								
	TOTAL IN A2			ON O	0.00000								
	TOTAL IN B1			ON O	0.00000								
	TOTAL IN B2			ON O	0.00000								
	TOTAL IN E			ON O	2.31819								
	TOTAL ON O				8.30616								

CONSIDER OVERLAPS IN BONDS LESS THAN 7.79700000 AU LONG

Tableau 27
Analyse de population de recouvrement pour $Mg^{2+}N_4O$.

MG(2+)N4O,C4V,MG(2+)=(321/21/1*),N=(321/21),O=(321/21),PA59										
OVERLAP POPULATIONS										
PAGE 1										
1. FROM A1	MOLECULAR ORBITALS		N2	N3	N3	N3	N4	N4	N4	N4
	N1	N2	N1	N3	N1	N2	N4	N1	N2	N3
	MG(2+)	MG(2+)		MG(2+)			MG(2+)			
4A1	.00090	.00090	.00000	.00090	.00000	.00000	.00090	.00000	.00000	.00000
5A1	.00035	.00035	.00001	.00035	.00000	.00001	.00035	.00001	.00000	.00001
6A1	-.00007	-.00007	.00014	-.00007	.00001	.00014	-.00007	.00014	.00014	.00014
7A1	-.00253	-.00253	.01925	-.00253	.00008	.01925	-.00253	.01925	.00068	.01925
8A1	-.00004	-.00004	.00015	-.00004	.00001	.00015	-.00004	.00015	.00001	.00015
9A1	-.00013	-.00013	.00568	-.00013	.00007	.00568	-.00013	.00568	.00007	.00568
TOTAL FROM A1	-.00150	-.00150	.02523	-.00150	.00077	.02523	-.00150	.02523	.00077	.02523
2. FROM A2	MOLECULAR ORBITALS		N2	N3	N3	N3	N4	N4	N4	N4
	N1	N2	N1	N3	N1	N2	N4	N1	N2	N3
	MG(2+)	MG(2+)		MG(2+)			MG(2+)			
1A2	0.00000	0.00000	-.02168	0.00000	-.00005	-.02168	0.00000	-.02168	-.00005	-.02168
TOTAL FROM A2	0.00000	0.00000	-.02168	0.00000	-.00005	-.02168	0.00000	-.02168	-.00005	-.02168
3. FROM B1	MOLECULAR ORBITALS		N2	N3	N3	N3	N4	N4	N4	N4
	N1	N2	N1	N3	N1	N2	N4	N1	N2	N3
	MG(2+)	MG(2+)		MG(2+)			MG(2+)			
2B1	.00002	.00002	-.01902	.00002	.00006	-.01902	.00002	-.01902	.00006	-.01902
TOTAL FROM B1	.00002	.00002	-.01902	.00002	.00006	-.01902	.00002	-.01902	.00006	-.01902
4. FROM B2	MOLECULAR ORBITALS		N2	N3	N3	N3	N4	N4	N4	N4
	N1	N2	N1	N3	N1	N2	N4	N1	N2	N3
	MG(2+)	MG(2+)		MG(2+)			MG(2+)			
1B2	.00001	.00001	.02146	.00001	-.00005	.02146	.00001	.02146	-.00005	.02146
TOTAL FROM B2	.00001	.00001	.02146	.00001	-.00005	.02146	.00001	.02146	-.00005	.02146
5. FROM E	MOLECULAR ORBITALS		N2	N3	N3	N3	N4	N4	N4	N4
	N1	N2	N1	N3	N1	N2	N4	N1	N2	N3
	MG(2+)	MG(2+)		MG(2+)			MG(2+)			
3E	.00007	.00822	.00001	.00007	.00000	.00001	.00822	.00001	-.00002	.00001
4E	.00822	.00007	.00001	.00822	-.00002	.00001	.00007	.00001	.00000	.00001
5E	-.00002	-.00331	.00097	-.00002	.00000	.00097	-.00002	.00097	-.00013	.00097
6E	-.00331	-.00002	.00097	-.00331	-.00133	.00097	-.00002	.00097	.00000	.00097
7E	-.00013	-.00024	.00250	-.00013	-.00001	.00250	-.00024	.00250	.00011	.00250
8E	-.00024	-.00013	.00250	-.00024	.00011	.00250	-.00013	.00250	-.00011	.00250
9E	.00000	-.00027	-.00003	.00000	.00000	-.00003	-.00027	-.00003	-.00000	-.00003
10E	-.00027	.00000	-.00003	-.00027	-.00006	-.00003	.00000	-.00003	.00000	-.00003
TOTAL FROM E	.00432	.00432	.00691	.00432	-.00132	.00691	.00432	.00691	-.00132	.00691
TOTAL FROM ALL	MOLECULAR ORBITALS		N2	N3	N3	N3	N4	N4	N4	N4
	N1	N2	N1	N3	N1	N2	N4	N1	N2	N3
	MG(2+)	MG(2+)		MG(2+)			MG(2+)			
OVERLAP CHARGE	.00284	.00284	.01291	.00284	.00000	.01291	.00284	.01291	.00000	.01291
DISTANCE (AU)	3.95003	3.95003	5.51260	3.95003	7.79600	5.51260	3.95003	5.51260	7.79600	5.51260

Tableau 27 (suite)

MG(2+)N4O,C4V,MG(2+)=(321/21/1*),N=(321/21),O=(321/21),PA59
OVERLAP POPULATIONS

PAGE 2

1. FROM A1	MOLECULAR ORBITALS				
	O	O	O	O	O
	MG(2+)	N1	N2	N3	N4
4A1	.00048	.00000	.00000	.00000	.00000
5A1	.00609	-.00001	-.00001	-.00001	-.00001
6A1	-.00325	.00136	.00136	.00136	.00136
7A1	.00010	-.00066	-.00066	-.00066	-.00066
8A1	-.00413	.00239	.00239	.00239	.00239
9A1	.00009	-.00078	-.00078	-.00078	-.00078
TOTAL FROM A1	-.00061	.00231	.00231	.00231	.00231
2. FROM A2	MOLECULAR ORBITALS				
	O	O	O	O	O
	MG(2+)	N1	N2	N3	N4
TOTAL FROM A2	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
3. FROM B1	MOLECULAR ORBITALS				
	O	O	O	O	O
	MG(2+)	N1	N2	N3	N4
TOTAL FROM B1	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
4. FROM B2	MOLECULAR ORBITALS				
	O	O	O	O	O
	MG(2+)	N1	N2	N3	N4
TOTAL FROM B2	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
5. FROM E	MOLECULAR ORBITALS				
	O	O	O	O	O
	MG(2+)	N1	N2	N3	N4
3E	.00007	.00000	.00001	.00000	.00001
4E	.00007	.00001	.00000	.00001	.00000
5E	-.00002	.00000	.00030	.00000	.00030
6E	-.00002	.00030	.00000	.00030	.00000
7E	-.00000	.00002	.00005	.00002	.00005
8E	-.00000	.00005	.00002	.00005	.00002
9E	-.00016	-.00004	.01192	-.00004	.01192
10E	-.00016	.01192	-.00004	.01192	-.00004
TOTAL FROM E	-.00023	.01227	.01227	.01227	.01227
TOTAL FROM ALL	MOLECULAR ORBITALS				
	O	O	O	O	O
	MG(2+)	N1	N2	N3	N4
OVERLAP CHARGE	-.00084	.01457	.01457	.01457	.01457
DISTANCE (AU)	3.85100	5.94597	5.94597	5.94597	5.94597

Tableau 28
Moment dipolaire de $\text{Mg}^{2+}\text{N}_4\text{O}$.

DIPOLE MOMENTS CALCULATED WITH REFERENCE TO THE POINT O COORDINATES			
	X	Y	Z
	0.000000	0.000000	1.821000
IN ATOMIC UNITS FOR GLOBAL COORDINATES			
	X	Y	Z
NUCLEAR	0.000000	0.000000	-171.932000
ELECTRON	.000000	.000000	162.821507
TOTAL	.000000	.000000	-9.110493
END PROPERTY ELAPSED TIME = 31.832 SECONDS			
ARGUMENT TOO SMALL, RESULT UNDERFLOW ERROR NUMBER 115 DETECTED BY EXP			
ARGUMENT TOO SMALL, RESULT UNDERFLOW ERROR NUMBER 115 DETECTED BY EXP			
ARGUMENT TOO SMALL, RESULT UNDERFLOW ERROR NUMBER 115 DETECTED BY EXP			
ARGUMENT TOO SMALL, RESULT UNDERFLOW ERROR NUMBER 115 DETECTED BY EXP			
ARGUMENT TOO SMALL, RESULT UNDERFLOW ERROR NUMBER 115 DETECTED BY EXP			
ARGUMENT TOO SMALL, RESULT UNDERFLOW ERROR NUMBER 115 DETECTED BY EXP			
ARGUMENT TOO SMALL, RESULT UNDERFLOW ERROR NUMBER 115 DETECTED BY EXP			
ARGUMENT TOO SMALL, RESULT UNDERFLOW ERROR NUMBER 115 DETECTED BY EXP			
ARGUMENT TOO SMALL, RESULT UNDERFLOW ERROR NUMBER 115 DETECTED BY EXP			
ARGUMENT TOO SMALL, RESULT UNDERFLOW ERROR NUMBER 115 DETECTED BY EXP			

Tableau 29
Moment quadropolaire de $\text{Mg}^{2+}\text{N}_4\text{O}$.

QUADRUPOLE MOMENTS CALCULATED WITH REFERENCE TO THE POINT O							
COORDINATES							
X	Y	Z					
0.000000	0.000000	3.851000					
IN ATOMIC UNITS FOR GLOBAL COORDINATES							
NUCLEAR ELECTRON TOTAL	QM(XX)	QM(YY)	QM(ZZ)	QM(XY)	QM(XZ)	QM(YZ)	RSQD
	-264.861778	-264.861778	529.723330	0.000000	0.000000	0.000000	1167.888524
	250.924326	250.924326	-501.840052	-0.000000	-0.000000	-0.000000	0.000000
	-13.937492	-13.937492	27.074934	0.000000	-0.000000	-0.000000	-8.685750

Tableau 30

Données pour PA20A du fragment Mg^{2+}N_4 dans une base minimum.

MG(2+)N4,D4H,MG(2+)=[11/11],N=[11/11],PA 20A

1 2

1

MGNLST

20 25

2 1 1 1 2 1 1 1 2 1 1 1 2 1 1 1 2 1 1 1

15 15

1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1
 -2 3 -3 2 -2 3 -3 -2 2 3 -3 2 -2 3 -3
 -3 -2 2 -3 3 2 -2 -3 3 -2 2 -3 3 2 -2
 4 4 4 -4 -4 -4 -4 -4 -4 -4 -4 4 4 4 4
 13 9 17 5 13 9 17 13 5 9 17 5 13 9 17
 -14 11-19 6-14 11-19-14 6 11-19 6-14 11-19
 -15-10 18 -7 15 10-18-15 7-10 18 -7 15 10-18
 16 12 20 -8-16-12-20-16 -8-12-20 8 16 12 20
 17 13 5 17 9 5 13 17 9 13 5 17 9 5 13
 -18 15 -7 18-10 7-15-18 10 15 -7 18-10 7-15
 -19-14 6-19 11 6-14-19 11-14 6-19 11 6-14
 20 16 8-20-12 -8-16-20-12-16 -8 20 12 8 16
 5 17 9 13 5 17 9 5 13 17 9 13 5 17 9
 -6 19-11 14 -6 19-11 -6 14 19-11 14 -6 19-11
 -7-18 10-15 7 18-10 -7 15-18 10-15 7 18-10
 8 20 12-16 -8-20-12 -8-16-20-12 16 8 20 12
 9 5 13 9 17 13 5 9 17 5 13 9 17 13 5
 -10 7-15 10-18 15 -7-10 18 7-15 10-18 15 -7
 -11 -6 14-11 19 14 -6-11 19 -6 14-11 19 14 -6
 12 8 16-12-20-16 -8-12-20 -8-16 12 20 16 8

Tableau 31

Données pour PA30A du fragment Mg^{2+}N_4 dans une base minimum.

0470

Tableau 33
Energies relatives à l'itération 28 pour $Mg^{2+}N_4$.

MG(2+)N4,04H,MG(2+)= (33/3)= (11/1),N= (33/3)= (11/1),PA40
PA40 CLOSED SHELL HARTREE-FOCK SELF-CONSISTENT-FIELD L.C.A.O. METHOD
RESULTS OF ITERATION 28

	PRESENT ITERATION	PREVIOUS ITERATION	CHANGE
KINETIC ENERGY, T =	413.6879309138	413.6879309381	-.0000000244
ONE ELECTRON POTENTIAL ENERGY, V(1) =	-1232.9842250928	-1232.9842254418	.0000003490
ONE ELECTRON ENERGY, H = T+V(1) =	-819.2962941790	-819.2962945037	.0000003247
TWO ELECTRON POTENTIAL ENERGY, V(1,2) =	272.3237167695	272.3237170943	-.0000003248
ELECTRONIC POTENTIAL ENERGY, V(E) = V(1)+V(1,2) =	-960.6605083232	-960.6605083475	.0000000243
ELECTRONIC ENERGY, E(E) = H+V(1,2) =	-546.9725774095	-546.9725774094	-.0000000001
NUCLEAR REPULSION ENERGY, V(N) =	134.3234810448	134.3234810448	
POTENTIAL ENERGY, V = V(E)+V(N) =	-826.3370272784	-826.3370273027	.0000000243
VIRIAL, -V/T =	1.9974888449	1.9974888449	
TOTAL ENERGY, E = E(E)+V(N) =	-412.6490963647	-412.6490963646	-.0000000001
ORBITAL ENERGIES (VALUES OF PREVIOUS ITERATION IN PARENTHESES)			
1. A1G ORBITALS, (5) (1 - 5)			
-49.38538344 (-49.38538341)	-15.98525961 (-15.98525960)	-4.45073250 (-4.45073247)	-1.45396944 (-1.45396942)
-.433192544 (-.433192543)			
2. A2G ORBITALS, (1) (6 - 6)			
-.86266345 (-.86266345)			
3. A2U ORBITALS, (2) (7 - 8)			
-2.94302060 (-2.94302057)	-.70736674 (-.70736673)		
4. B1G ORBITALS, (3) (9 - 11)			
-15.98645271 (-15.98645270)	-1.41538225 (-1.41538224)	-.37267937 (-.37267936)	
5. B2G ORBITALS, (1) (12 - 12)			
-.92716790 (-.92716790)			
6. B2U ORBITALS, (1) (13 - 13)			
-.68841061 (-.68841060)			
7. EG ORBITALS, (2) (14 - 15)			
-.57172514 (-.57172513)	-.57172514 (-.57172513)		
8. EU ORBITALS, (10) (16 - 25)			
-15.98564371 (-15.98564370)	-15.98564371 (-15.98564370)	-2.94664936 (-2.94664933)	-2.94664936 (-2.94664933)
-1.43166143 (-1.43166142)	-1.43166143 (-1.43166142)	-.89555595 (-.89555594)	-.89555595 (-.89555594)
-.39735402 (-.39735401)	-.39735402 (-.39735401)		

COMPUTED ENERGY ELAPSED TIME = .169 SECONDS

FINISHED SCF ELAPSED TIME = .003 SECONDS

Tableau 34
Données pour PA40 du fragment $Mg^{2+}N_4$ dans une base minimum.

HG(2+)N4,D4H,HG(2+)={33/3}={11/11},N={33/3}={11/11},PA40																			
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0																			
MGNINT																			
20 20																			
3 A1G 4																			
1 1.0																			
5 0.25 9 0.25 13 0.25 17 0.25																			
6 0.25 11 0.25 14 -0.25 19 -0.25																			
1 A2G 4																			
7 0.25 10 -0.25 15 -0.25 18 0.25																			
2 A2U 4																			
4 1.0																			
8 0.25 12 0.25 16 0.25 20 0.25																			
2 B1G 4																			
5 0.25 9 -0.25 13 0.25 17 -0.25																			
6 0.25 11 -0.25 14 -0.25 19 0.25																			
1 B2G 4																			
7 0.25 10 0.25 15 -0.25 18 -0.25																			
1 B2U 4																			
8 0.25 12 -0.25 16 0.25 20 -0.25																			
2 EG 4																			
8 0.5 16 -0.5																			
12 0.5 20 -0.5																			
8 EU 4																			
2 1.0																			
3 1.0																			
5 0.5 13 -0.5																			
9 0.5 17 -0.5																			
6 0.5 14 0.5																			
10 0.5 18 0.5																			
7 0.5 15 0.5																			
11 0.5 19 0.5																			
2 1 1 1 2 1 1 1 2 1 1 1 2 1 1 1 2 1 1 1																			
5																			
1.0 1.0 1.0 0.0																			
1																			
1.0																			
2																			
1.0 0.0																			
3																			
1.0 1.0 0.0																			
1																			
1.0																			
1																			
0.0																			
2																			
1.0 1.0																			
10																			
1.0 1.0 1.0 1.0 1.0																			
1.0 1.0 0.0 0.0																			
.0000000001 .00000001																			
2 30 30 1 0 0																			

Tableau 35
Energies relatives à l'itération 28 pour $Mg^{2+}N_4$.

MG(2+)N4, D4H, MG(2+)=(33/3), N=(33/3), PA40 PA40 CLOSED SHELL HARTREE-FOCK SELF-CONSISTENT-FIELD L.C.A.O. METHOD RESULTS OF ITERATION 28			
	PRESENT ITERATION	PREVIOUS ITERATION	CHANGE
KINETIC ENERGY, T =	413.6819343318	413.6819343561	-.0000000243
ONE ELECTRON POTENTIAL ENERGY, V(1) =	-1232.9747961754	-1232.9747965244	.0000003490
ONE ELECTRON ENERGY, H = T+V(1) =	-819.2928618436	-819.2928621683	.0000003247
TWO ELECTRON POTENTIAL ENERGY, V(1,2) =	272.3196461838	272.3196465085	-.0000003248
ELECTRONIC POTENTIAL ENERGY, V(E) = V(1)+V(1,2) =	-960.6551499917	-960.6551500159	.0000000242
ELECTRONIC ENERGY, E(E) = H+V(1,2) =	-546.9732156598	-546.9732156597	-.0000000001
NUCLEAR REPULSION ENERGY, V(N) =	134.3234810448	134.3234810448	
POTENTIAL ENERGY, V = V(E)+V(N) =	-826.3316689469	-826.3316689711	.0000000242
VIRIAL, -V/T =	1.9975048470	1.9975048469	
TOTAL ENERGY, E = E(E)+V(N) =	-412.6497346150	-412.6497346149	-.0000000001
ORBITAL ENERGIES (VALUES OF PREVIOUS ITERATION IN PARENTHESES)			
1. A1G ORBITALS, (5) (1 - 5) -49.38608828 (-49.38608825) -15.98526224 (-15.98526223) -4.45104236 (-4.45104233) -1.45260379 (-1.45260378) -.43188786 (-.43188785)			
2. A2G ORBITALS, (1) (6 - 6) -.86268311 (-.86268310)			
3. A2U ORBITALS, (2) (7 - 8) -2.94324795 (-2.94324792) -.58093997 (-.58093996)			
4. B1G ORBITALS, (3) (9 - 11) -15.98605481 (-15.98605479) -1.41410176 (-1.41410175) -.37264663 (-.37264662)			
5. B2G ORBITALS, (1) (12 - 12) -.92720558 (-.92720558)			
6. B2U ORBITALS, (1) (13 - 13) -.56220110 (-.56220109)			
7. EG ORBITALS, (2) (14 - 15) -.69805355 (-.69805354) -.69805355 (-.69805354)			
8. EU ORBITALS, (10) (16 - 25) -15.98567255 (-15.98567254) -15.98567255 (-15.98567254) -2.94699265 (-2.94699262) -2.94699265 (-2.94699262) -1.43299164 (-1.43299163) -1.43299164 (-1.43299163) -.89553696 (-.89553695) -.89553696 (-.89553695) -.39740417 (-.39740416) -.39740417 (-.39740416)			
COMPUTED ENERGY ELAPSED TIME = .080 SECONOS			
FINISHED SCF ELAPSED TIME = .002 SECONOS			

Tableau 36
OM de l'itération 28 pour Mg^{2+}N_4 .

MG(2+)N4,D4H,MG(2+)=(33/3),N=(33/3),PA40										
MOLECULAR ORBITALS										
ITERATION 28										
ROW	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
1A1G	-49.3860883	1.000000								
1	-.9903094	-.0398541	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.0000959	.0005226	-.0010034	0.0000000	0.0000000
	-.0000959	.0005226	0.0000000	-.0010034	0.0000000	-.0000959	.0005226	.0010034	0.0000000	0.0000000
	-.0000959	.0005226	0.0000000	.0010034	0.0000000					
2A1G	-15.9852622	1.000000								
2	.0002737	-.0014351	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.4963140	.0171617	-.0004965	0.0000000	0.0000000
	.4963140	.0171617	0.0000000	-.0004965	0.0000000	.4963140	.0171617	-.0004965	0.0000000	0.0000000
	.4963140	.0171617	0.0000000	-.0004965	0.0000000					
3A1G	-4.4510424	1.000000								
3	.2689944	-1.0250219	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.0004254	-.0017354	.0016476	0.0000000	0.0000000
	.0004254	-.0017354	0.0000000	.0016476	0.0000000	.0004254	-.0017354	-.0016476	0.0000000	0.0000000
	.0004254	-.0017354	0.0000000	-.0016476	0.0000000					
4A1G	-1.4526038	1.000000								
4	.0115651	-.0614477	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.1149398	.4959385	-.0677578	0.0000000	0.0000000
	-.1149398	.4959385	0.0000000	-.0677578	0.0000000	-.1149398	.4959385	.0677578	0.0000000	0.0000000
	-.1149398	.4959385	0.0000000	.0677578	0.0000000					
5A1G	-.4318879									
5	-.0154311	.0823934	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.0192880	.0835567	.4864668	0.0000000	0.0000000
	-.0192880	.0835567	0.0000000	.4864668	0.0000000	-.0192880	.0835567	-.4864668	0.0000000	0.0000000
	-.0192880	.0835567	0.0000000	-.4864668	0.0000000					
1A2G	-.8626831	1.000000								
6	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.5113586	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	-.5113586	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.5113586	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	.5113586	0.0000000	0.0000000					
1A2U	-2.9432480	1.000000								
7	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.9998354	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.0032603
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.0032603	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.0032603
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.0032603					
2A2U	-.5809400									
8	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.0192421	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.4976313
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.4976313	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.4976313
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.4976313					
1B1G	-15.9860548	1.000000								
9	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.4961356	-.0180559	.0004221	0.0000000	0.0000000
	.4961356	.0180559	0.0000000	-.0004221	0.0000000	-.4961356	-.0180559	-.0004221	0.0000000	0.0000000
	.4961356	.0180559	0.0000000	.0004221	0.0000000					
2B1G	-1.4141018	1.000000								
10	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.1191032	-.5160006	.0576322	0.0000000	0.0000000
	-.1191032	.5160006	0.0000000	-.0576322	0.0000000	.1191032	-.5160006	-.0576322	0.0000000	0.0000000
	-.1191032	.5160006	0.0000000	.0576322	0.0000000					
3B1G	-.3726466									
11	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.0097774	.0411996	.5081244	0.0000000	0.0000000
	.0097774	-.0411996	0.0000000	-.5081244	0.0000000	-.0097774	.0411996	-.5081244	0.0000000	0.0000000
	.0097774	-.0411996	0.0000000	.5081244	0.0000000					

Tableau 36 (suite)

182G	- .9272056	1.00000								
12	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.4893918	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	.4893918	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.4893918	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	-.4893918	0.0000000	0.0000000					
182U	- .5622011									
13	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.5024054
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.5024054	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.5024054
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.5024054					
1EG	- .6980535	1.00000								
14	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.7071261
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.7071261
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000					
2EG	- .6980535	1.00000								
15	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.7071261	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.7071261					
1EU	-15.9856725	1.00000								
16	0.0000000	0.0000000	.0008270	0.0000000	0.0000000	-.7017663	-.0249084	-.0000531	0.0000000	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	.0006947	0.0000000	0.0000000	.7017663	.0249084	-.0000531	0.0000000	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	.0006947	0.0000000	0.0000000					
2EU	-15.9856725	1.00000								
17	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.0008270	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.0006947	0.0000000
	-.7017663	-.0249084	0.0000000	-.0000531	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.0006947	0.0000000
	.7017663	.0249084	0.0000000	-.0000531	0.0000000					
3EU	-2.9469927	1.00000								
18	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.9977438	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.0028301	0.0000000
	-.0035027	.0148921	0.0000000	-.0150716	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.0028301	0.0000000
	.0035027	-.0148921	0.0000000	-.0150716	0.0000000					
4EU	-2.9469927	1.00000								
19	0.0000000	0.0000000	-.9977438	0.0000000	0.0000000	.0035027	-.0148921	.0150716	0.0000000	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	0.0028301	0.0000000	0.0000000	-.0035027	.0148921	.0150716	0.0000000	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	-.0028301	0.0000000	0.0000000					
5EU	-1.4329916	1.00000								
20	0.0000000	0.0000000	.0571184	0.0000000	0.0000000	.1653599	-.7149158	.0871798	0.0000000	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	-.0182600	0.0000000	0.0000000	-.1653599	.7149158	.0871798	0.0000000	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	-.0182600	0.0000000	0.0000000					
6EU	-1.4329916	1.00000								
21	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.0571184	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.0182600	0.0000000
	.1653599	-.7149158	0.0000000	.0871798	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.0182600	0.0000000
	-.1653599	.7149158	0.0000000	.0871798	0.0000000					
7EU	-.8955370	1.00000								
22	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.0150047	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.7049432	0.0000000
	.0112448	-.0495958	0.0000000	-.0352321	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.7049432	0.0000000
	-.0112448	.0495958	0.0000000	-.0352321	0.0000000					
8EU	-.8955370	1.00000								
23	0.0000000	0.0000000	-.0150047	0.0000000	0.0000000	.0112448	-.0495958	-.0352321	0.0000000	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	.7049432	0.0000000	0.0000000	-.0112448	.0495958	-.0352321	0.0000000	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	.7049432	0.0000000	0.0000000					
9EU	-.3974042									
24	0.0000000	0.0000000	.0710412	0.0000000	0.0000000	-.0196103	.0841237	.7025696	0.0000000	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	.0619070	0.0000000	0.0000000	.0196103	-.0841237	.7025696	0.0000000	0.0000000

Tableau 37
Analyse de population de Mulliken pour Mg^{2+}N_4 .

MULLIKEN POPULATION ANALYSIS												
MG(2+)N4, R4H, MG(2+)=133/31, N=(33/3), PA59												
			1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
MG(2+) S	1	A1G	1.97914	.00000	.02077	.00004	.00006					
		TOTAL IN A1G		1.99994								
MG(2+) S	2	A1G	.02090	-.00000	1.97830	.00043	.00037					
		TOTAL IN A1G		1.99963								
MG(2+) X	3	EU	-.00000	0.00000	0.00000	1.99459	.00266	0.00000	0.00000	.00015	.00260	0.00000
		TOTAL IN EU		1.99740								
MG(2+) Y	4	EU	0.00000	-.00000	1.99459	0.00000	0.00000	.00266	.00015	0.00000	0.00000	.00260
		TOTAL IN EU		1.99740								
MG(2+) Z	5	A2U	1.99975	.00025								
		TOTAL IN A2U		1.99975								
MG(2+) TOTAL IN A1G		ON MG(2+)	3.99957									
TOTAL IN A2G		ON MG(2+)	0.00000									
TOTAL IN A2U		ON MG(2+)	1.99975									
TOTAL IN B1G		ON MG(2+)	0.00000									
TOTAL IN B2G		ON MG(2+)	0.00000									
TOTAL IN B2U		ON MG(2+)	0.00000									
TOTAL IN EG		ON MG(2+)	0.00000									
TOTAL IN EU		ON MG(2+)	3.99480									
		TOTAL ON MG(2+)	9.99412									

Tableau 37 (suite)

MULLIKEN POPULATION ANALYSIS													
MG(2+)N4,D4H,MG(2+)= (33/3),N=(33/3),PA59													
				1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
N1	S	6	A1G	-.00000	.49603	.00000	.00386	.00011					
			TOTAL IN A1G		.49989								
			B1G	.49583	.00414	.00003							
			TOTAL IN B1G		.49997								
			EU	.99186	0.00000	0.00000	.00000	.00799	0.00000	0.00000	.00004	.00012	0.00000
			TOTAL IN EU		.99988								
			TOTAL		1.99974								
N1	S	7	A1G	-.00000	.00397	.00008	.48458	.01136					
			TOTAL IN A1G		.48864								
			B1G	.00417	.49138	.00446							
			TOTAL IN B1G		.49554								
			EU	.00814	0.00000	0.00000	.00098	.97427	0.00000	0.00000	.00248	.01413	0.00000
			TOTAL IN EU		.98587								
			TOTAL		1.97005								
N1	X	8	A1G	-.00001	-.00000	.00015	.01144	.48842					
			TOTAL IN A1G		.01158								
			B1G	-.00000	.00449	.49551							
			TOTAL IN B1G		.00449								
			EU	.00000	0.00000	0.00000	.00167	.01481	0.00000	0.00000	.00414	.97938	0.00000
			TOTAL IN EU		.02062								
			TOTAL		.03669								
N1	Y	9	A2G	.50000									
			TOTAL IN A2G		.50000								
			B2G	.50000									
			TOTAL IN B2G		.50000								
			EU	0.00000	-.00000	.00006	0.00000	0.00000	.00160	.99327	0.00000	0.00000	.00507
			TOTAL IN EU		.99493								
			TOTAL		1.99493								
N1	Z	10	EG	1.00000	0.00000								
			TOTAL IN EG		1.00000								
N1	TOTAL IN A1G			ON N1	1.00011								
	TOTAL IN A2G			ON N1	.50000								
	TOTAL IN A2U			ON N1	.00006								
	TOTAL IN B1G			ON N1	1.00000								
	TOTAL IN B2G			ON N1	.50000								
	TOTAL IN B2U			ON N1	0.00000								
	TOTAL IN EG			ON N1	1.00000								
	TOTAL IN EU			ON N1	3.00130								
	TOTAL ON N1				7.00147								

Tableau 37 (suite)

MULLIKEN POPULATION ANALYSIS													
MG(2+)N4.D4H.MG(2+)= (33/3).N= (33/3).PA59													
				1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
N2	S	11	A1G	-.00000	.49603	.00000	.00386	.00011					
			TOTAL IN A1G		.49989								
			B1G	.49583	.00414	.00303							
			TOTAL IN B1G		.49997								
			EU	0.00000	.99186	.00000	0.00000	0.00000	.00799	.00004	0.00000	0.00000	.00012
			TOTAL IN EU		.99988								
			TOTAL		1.99974								
N2	S	12	A1G	-.00000	.00397	.00008	.48458	.01136					
			TOTAL IN A1G		.48864								
			B1G	.00417	.49138	.00446							
			TOTAL IN B1G		.49554								
			EU	0.00000	.00014	.00098	0.00000	0.00000	.97427	.00248	0.00000	0.00000	.01413
			TOTAL IN EU		.98587								
			TOTAL		1.97005								
N2	X	13	A2G	.50000									
			TOTAL IN A2G		.50000								
			B2G	.50000									
			TOTAL IN B2G		.50000								
			EU	-.00000	0.00000	0.00000	.00006	.00160	0.00000	0.00000	.99327	.00507	0.00000
			TOTAL IN EU		.99493								
			TOTAL		1.99493								
N2	Y	14	A1G	-.00001	-.00000	.00015	.01144	.48842					
			TOTAL IN A1G		.01158								
			B1G	-.00000	.00449	.49551							
			TOTAL IN B1G		.00449								
			EU	0.00000	.00400	.00167	0.00000	0.00000	.01481	.00414	0.00000	0.00000	.97938
			TOTAL IN EU		.02062								
			TOTAL		.03669								
N2	Z	15	EG	0.00000	1.00000								
			TOTAL IN EG		1.00000								
N2	TOTAL IN A1G			ON N2	1.00011								
	TOTAL IN A2G			ON N2	.50000								
	TOTAL IN A2U			ON N2	.00006								
	TOTAL IN B1G			ON N2	1.00000								
	TOTAL IN B2G			ON N2	.50000								
	TOTAL IN B2U			ON N2	0.00000								
	TOTAL IN EG			ON N2	1.00000								
	TOTAL IN EU			ON N2	3.00130								
	TOTAL			ON N2	7.00147								

Tableau 37 (suite)

MULLIKEN POPULATION ANALYSIS													
HG(2+)N4,D4H,HG(2+)= (33/3),N= (33/3),PA59													
				1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
N3	S	16	A1G	-.00000	.49603	.00000	.00386	.00011					
			TOTAL IN A1G		.49989								
			B1G	.49583	.00414	.00003							
			TOTAL IN B1G		.49997								
			EU	.99186	0.00000	0.00000	.00000	.00799	0.00000	0.00000	.00004	.00012	0.00000
			TOTAL IN EU		.99988								
			TOTAL		1.99974								
N3	S	17	A1G	-.00000	.00397	.00000	.48458	.01136					
			TOTAL IN A1G		.48864								
			B1G	.00417	.49138	.00446							
			TOTAL IN B1G		.49554								
			EU	.00814	0.00000	0.00000	.00098	.97427	0.00000	0.00000	.00248	.01413	0.00000
			TOTAL IN EU		.98587								
			TOTAL		1.97005								
N3	X	18	A1G	-.00001	-.00000	.00015	.01144	.48842					
			TOTAL IN A1G		.01158								
			B1G	-.00000	.00449	.49551							
			TOTAL IN B1G		.00449								
			EU	.00000	0.00000	0.00000	.00167	.01481	0.00000	0.00000	.00414	.97938	0.00000
			TOTAL IN EU		.02062								
			TOTAL		.03669								
N3	Y	19	A2G	.50000									
			TOTAL IN A2G		.50000								
			B2G	.50000									
			TOTAL IN B2G		.50000								
			EU	0.00000	-.00000	.00006	0.00000	0.00000	.00160	.99327	0.00000	0.00000	.00507
			TOTAL IN EU		.99493								
			TOTAL		1.99493								
N3	Z	20	EG	1.00000	0.00000								
			TOTAL IN EG		1.00000								
N3	TOTAL IN A1G		ON N3	1.00011									
	TOTAL IN A2G		ON N3	.50000									
	TOTAL IN A2U		ON N3	.00006									
	TOTAL IN B1G		ON N3	1.00000									
	TOTAL IN B2G		ON N3	.50000									
	TOTAL IN B2U		ON N3	0.00000									
	TOTAL IN EG		ON N3	1.00000									
	TOTAL IN EU		ON N3	3.00130									
	TOTAL ON N3			7.00147									

Tableau 37 (suite)

MULLIKEN POPULATION ANALYSIS													
MG(2+)N4,D4H,MG(2+)=(33/3),N=(33/3),PA59													
				1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
N4	S	21	A1G	-.00000	.49603	.00000	.00386	.00011					
			TOTAL IN A1G	.49989									
			B1G	.49583	.00414	.00003							
			TOTAL IN B1G	.49997									
			EU	0.00000	.99186	.00000	0.00000	0.00000	.00799	.00004	0.00000	0.00000	.00012
			TOTAL IN EU	.99988									
			TOTAL	1.99974									
N4	S	22	A1G	-.00000	.00397	.00008	.48458	.01136					
			TOTAL IN A1G	.48864									
			B1G	.00417	.49138	.00446							
			TOTAL IN B1G	.49554									
			EU	0.00000	.00814	.00098	0.00000	0.00000	.97427	.00248	0.00000	0.00000	.01413
			TOTAL IN EU	.98587									
			TOTAL	1.97005									
N4	X	23	A2G	.50000									
			TOTAL IN A2G	.50000									
			B2G	.50000									
			TOTAL IN B2G	.50000									
			EU	-.00000	0.00000	0.00000	.00006	.00160	0.00000	0.00000	.99327	.00507	0.00000
			TOTAL IN EU	.99493									
			TOTAL	1.99493									
N4	Y	24	A1G	-.00001	-.00000	.00015	.01144	.48842					
			TOTAL IN A1G	.01158									
			B1G	-.00000	.00449	.49551							
			TOTAL IN B1G	.00449									
			EU	0.00000	.00000	.00167	0.00000	0.00000	.01481	.06414	0.00000	0.00000	.97938
			TOTAL IN EU	.02062									
			TOTAL	.03669									
N4	Z	25	EG	0.00000	1.00000								
			TOTAL IN EG	1.00000									
N4	TOTAL IN A1G		ON N4	1.00011									
	TOTAL IN A2G		ON N4	.50000									
	TOTAL IN A2U		ON N4	.00006									
	TOTAL IN B1G		ON N4	1.00000									
	TOTAL IN B2G		ON N4	.50000									
	TOTAL IN B2U		ON N4	0.00000									
	TOTAL IN EG		ON N4	1.00000									
	TOTAL IN EU		ON N4	3.40130									
	TOTAL		ON N4	7.00147									
CONSIDER OVERLAPS IN BONDS LESS THAN 7.79700000 AU LONG													

Tableau 38
Analyse de population de recouvrement pour $Mg^{2+}N_4$.

MG(2+)N ₄ ,D _{4h} ,MG(2+)=(33/3),N=(33/3),PA59										
OVERLAP POPULATIONS										
PAGE 1										
1. FROM A1G	MOLECULAR ORBITALS									
	N1	N2	N2	N3	N3	N3	N4	N4	N4	N4
	MG(2+)	MG(2+)	N1	MG(2+)	N1	N2	MG(2+)	N1	N2	N3
3A1G	.00044	.00044	.00000	.00044	.00000	.00000	.00044	.00000	.00000	.00000
4A1G	-.00336	-.00336	.01876	-.00336	.00066	.01876	-.00336	.01876	.00066	.01876
TOTAL FROM A1G	-.00294	-.00294	.01878	-.00294	.00066	.01878	-.00294	.01878	.00066	.01878
2. FROM A2G	MOLECULAR ORBITALS									
	N1	N2	N2	N3	N3	N3	N4	N4	N4	N4
	MG(2+)	MG(2+)	N1	MG(2+)	N1	N2	MG(2+)	N1	N2	N3
1A2G	0.00000	0.00000	-.02295	0.00000	-.00006	-.02295	0.00000	-.02295	-.00006	-.02295
TOTAL FROM A2G	0.00000	0.00000	-.02295	0.00000	-.00006	-.02295	0.00000	-.02295	-.00006	-.02295
3. FROM A2U	MOLECULAR ORBITALS									
	N1	N2	N2	N3	N3	N3	N4	N4	N4	N4
	MG(2+)	MG(2+)	N1	MG(2+)	N1	N2	MG(2+)	N1	N2	N3
1A2U	.00008	.00008	.00000	.00008	.00000	.00000	.00008	.00000	.00000	.00000
TOTAL FROM A2U	.00008	.00008	.00000	.00008	.00000	.00000	.00008	.00000	.00000	.00000
4. FROM B1G	MOLECULAR ORBITALS									
	N1	N2	N2	N3	N3	N3	N4	N4	N4	N4
	MG(2+)	MG(2+)	N1	MG(2+)	N1	N2	MG(2+)	N1	N2	N3
2B1G	0.00000	0.00000	-.01931	0.00000	.00067	-.01931	0.00000	-.01931	.00067	-.01931
TOTAL FROM B1G	0.00000	0.00000	-.01934	0.00000	.00067	-.01934	0.00000	-.01934	.00067	-.01934
5. FROM B2G	MOLECULAR ORBITALS									
	N1	N2	N2	N3	N3	N3	N4	N4	N4	N4
	MG(2+)	MG(2+)	N1	MG(2+)	N1	N2	MG(2+)	N1	N2	N3
1B2G	0.00000	0.00000	.02102	0.00000	-.00005	.02102	0.00000	.02102	-.00005	.02102
TOTAL FROM B2G	0.00000	0.00000	.02102	0.00000	-.00005	.02102	0.00000	.02102	-.00005	.02102
6. FROM B2U	MOLECULAR ORBITALS									
	N1	N2	N2	N3	N3	N3	N4	N4	N4	N4
	MG(2+)	MG(2+)	N1	MG(2+)	N1	N2	MG(2+)	N1	N2	N3
TOTAL FROM B2U	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
7. FROM EG	MOLECULAR ORBITALS									
	N1	N2	N2	N3	N3	N3	N4	N4	N4	N4
	MG(2+)	MG(2+)	N1	MG(2+)	N1	N2	MG(2+)	N1	N2	N3
1EG	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	-.00011	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
2EG	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	-.00011	0.00000
TOTAL FROM EG	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	-.00011	0.00000	0.00000	0.00000	-.00011	0.00000
8. FROM EU	MOLECULAR ORBITALS									
	N1	N2	N2	N3	N3	N3	N4	N4	N4	N4
	MG(2+)	MG(2+)	N1	MG(2+)	N1	N2	MG(2+)	N1	N2	N3
3EU	.00007	.00353	.00001	.00007	.00000	.00001	.00353	.00001	-.00000	.00001
4EU	.00353	.00007	.00001	.00353	-.00000	.00001	.00007	.00001	.00000	.00001
5EU	-.00383	-.00003	.00095	-.00383	-.00132	.00095	-.00003	.00095	.00000	.00095
6EU	-.00003	-.00383	.00095	-.00003	.00000	.00095	-.00383	.00095	.00000	.00095

Tableau 38 (suite)

7EU	-.00027	-.00003	-.00054	-.00027	.00011	-.00054	-.00003	-.00054	.00000	-.00054
8EU	-.00003	-.00027	-.00054	-.00003	.00000	-.00054	-.00027	-.00054	.00011	-.00054
TOTAL FROM EU	-.00056	-.00056	.00082	-.00056	-.00122	.00082	-.00056	.00082	-.00122	.00082
TOTAL FROM ALL MOLECULAR ORBITALS										
	N1	N2	N2	N3	N3	N3	N4	N4	N4	N4
	HG(2+)	HG(2+)	N1	HG(2+)	N1	N2	HG(2+)	N1	N2	N3
OVERLAP CHARGE	-.00342	-.00342	-.00167	-.00342	-.00010	-.00167	-.00342	-.00167	-.00010	-.00167
DISTANCE (AU)	3.89800	3.89800	5.51260	3.89800	7.79600	5.51260	3.89800	5.51260	7.79600	5.51260

Tableau 39
Données pour PA41 du fragment $Mg^{2+}N_4$ dans une base minimum.

MG(2+)N4,04H,MG(2+)={33/3}={11/1},N={33/3}={11/1},PA41														
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 1 0 0 0 0 0 0														
MGNINT														
20 20														
3 A1G 4														
1 1.0														
5 0.25 9 0.25 13 0.25 17 0.25														
6 0.25 11 0.25 14 -0.25 19 -0.25														
1 A2G 4														
7 0.25 10 -0.25 15 -0.25 18 0.25														
2 A2U 4														
4 1.0														
8 0.25 12 0.25 16 0.25 20 0.25														
2 B1G 4														
5 0.25 9 -0.25 13 0.25 17 -0.25														
6 0.25 11 -0.25 14 -0.25 19 0.25														
1 B2G 4														
7 0.25 10 0.25 15 -0.25 18 -0.25														
1 B2U 4														
8 0.25 12 -0.25 16 0.25 20 -0.25														
2 EG 4														
8 0.5 16 -0.5														
12 0.5 20 -0.5														
8 EU 4														
2 1.0														
3 1.0														
5 0.5 13 -0.5														
9 0.5 17 -0.5														
6 0.5 14 0.5														
10 0.5 18 0.5														
7 0.5 15 0.5														
11 0.5 19 0.5														
2 1 1 1 2 -1 -1 -1 -2 1 1 1 2 -1 1 1 2 -1 -1 -1														
5														
1.0 0.0 1.0 0.0 1.0 0.0														
1.0 0.0 1.0 0.0														
1														
0.0 0.0														
2														
1.0 0.0 1.0 0.0														
3														
1.0 0.0 1.0 0.0 0.0 0.0														
1														
1.0 0.0														
1														
0.0 0.0														
2														
0.0 0.5 0.0 0.5														
10														
1.0 0.0 1.0 0.0 1.0 0.0														
1.0 0.0 1.0 0.0 1.0 0.0														
1.0 0.0 1.0 0.0 0.0 0.0														
0.0 0.0														
0.0 -2.0 0.5														
.0000000001 .00000001														
2 30 30 1 0 0														

Tableau 40
Energies relatives à l'itération 30 pour $Mg^{2+}N_4$.

MG(2+)N4,D4H,MG(2+)= (33/3)=[11/1],N= (33/3)=[11/1],PA41
PA41 SINGLE HAMILTONIAN OPEN SHELL HARTREE-FOCK LCAO-MO-SCF PACKAGE
RESULTS OF ITERATION 30

	PRESENT ITERATION	PREVIOUS ITERATION	CHANGE
KINETIC ENERGY, T =	413.3554342396	413.3554452285	-.0000109889
ONE ELECTRON POTENTIAL ENERGY, V(1) =	-1232.6824342896	-1232.6824536305	.0000193409
ONE ELECTRON ENERGY, H = T+V(1) =	-819.3270000500	-819.3270084020	.0000083520
TWO ELECTRON POTENTIAL ENERGY, V(1,2) =	272.5136903842	272.5136987407	-.0000083565
ELECTRONIC POTENTIAL ENERGY, V(E) = V(1)+V(1,2) =	-960.1687439054	-960.1687548898	.0000109844
ELECTRONIC ENERGY, E(E) = H+V(1,2) =	-546.8133096658	-546.8133096613	-.0000000045
NUCLEAR REPULSION ENERGY, V(N) =	134.3234810448	134.3234810448	
POTENTIAL ENERGY, V = V(E)+V(N) =	-825.8452628606	-825.8452738450	.0000109844
VIRIAL, -V/T =	1.9979059048	1.9979058783	
TOTAL ENERGY, E = E(E)+V(N) =	-412.4898286210	-412.4898286165	-.0000000045

ORBITAL ENERGIES (VALUES OF PREVIOUS ITERATION IN PARENTHESES)

1. A1G ORBITALS, COMBINED (5) (1 - 5)	-49.35214000 (-49.35214078)	-15.99926943 (-15.99926816)	-4.42241463 (-4.42241511)	-1.41328492 (-1.41328388)
	-.67975131 (-.67974732)			
2. A2G ORBITALS, COMBINED (1) (6 - 6)	-.62812627 (-.62812928)			
3. A2U ORBITALS, COMBINED (2) (7 - 8)	-2.91462530 (-2.91462578)	-.45622795 (-.45622725)		
4. B1G ORBITALS, COMBINED (3) (9 - 11)	-15.99987421 (-15.99987294)	-1.35519549 (-1.35519486)	-.48636753 (-.48636376)	
5. B2G ORBITALS, COMBINED (1) (12 - 12)	-.84514247 (-.84514506)			
6. B2U ORBITALS, COMBINED (1) (13 - 13)	-.84336885 (-.84336816)			
7. EG ORBITALS, COMBINED (2) (14 - 15)	-.64865816 (-.64865746)	-.64865816 (-.64865746)		
8. EU ORBITALS, COMBINED (10) (16 - 25)	-15.99954161 (-15.99954033)	-15.99954161 (-15.99954033)	-2.91692043 (-2.91692090)	-2.91692043 (-2.91692090)
	-1.37973748 (-1.37973658)	-1.37973748 (-1.37973658)	-.78640747 (-.78640921)	-.78640747 (-.78640921)
	-.52939882 (-.52939604)	-.52939882 (-.52939604)		

COMPUTED ENERGY ELAPSED TIME = .099 SECONDS

FINISHED SCF ELAPSED TIME = .822 SECONDS

Tableau 42
Energies relatives à l'itération 28 pour $Mg^{2+}N_4$.

MG(2+)N4,04h,MG(2+)=(33/3)=[11/1],N=(33/3)=[11/1],PA41 PA41 SINGLE HAMILTONIAN OPEN SHELL HARTREE-FOCK LCAO-MO-SCF PACKAGE RESULTS OF ITERATION 28			
	PRESENT ITERATION	PREVIOUS ITERATION	CHANGE
KINETIC ENERGY, T =	413.7298126241	413.7298126244	-.0000000002
ONE ELECTRON POTENTIAL ENERGY, V(1) =	-1233.0262867123	-1233.0262867476	.0000000353
ONE ELECTRON ENERGY, H = T+V(1) =	-819.2964740802	-819.2964741232	.0000000350
TWO ELECTRON POTENTIAL ENERGY, V(1,2) =	272.1719295604	272.1719295955	-.0000000351
ELECTRONIC POTENTIAL ENERGY, V(E) = V(1)+V(1,2) =	-960.8543571519	-960.8543571520	.0000000002
ELECTRONIC ENERGY, E(E) = H+V(1,2) =	-547.1245445278	-547.1245445277	-.0000000001
NUCLEAR REPULSION ENERGY, V(N) =	134.3234810440	134.3234810440	
POTENTIAL ENERGY, V = V(E)+V(N) =	-826.5308761071	-826.5308761073	.0000000002
VIRIAL, -V/T =	1.9977551796	1.9977551796	
TOTAL ENERGY, E = E(E)+V(N) =	-412.8010634830	-412.8010634829	-.0000000001
ORBITAL ENERGIES (VALUES OF PREVIOUS ITERATION IN PARENTHESES)			
1. A1G ORBITALS, COMBINED (5) (1 - 5)			
-49.38709168 (-49.38709168)	-15.97007260 (-15.97007259)	-4.45204354 (-4.45204354)	-1.38454226 (-1.38454226)
-.45001876 (-.45001876)			
2. A2G ORBITALS, COMBINED (1) (6 - 6)			
-.84338774 (-.84338774)			
3. A2U ORBITALS, COMBINED (2) (7 - 8)			
-2.94423916 (-2.94423915)	-.84551401 (-.84551400)		
4. B1G ORBITALS, COMBINED (3) (9 - 11)			
-15.97085021 (-15.97085021)	-1.34623675 (-1.34623675)	-.39072846 (-.39072846)	
5. B2G ORBITALS, COMBINED (1) (12 - 12)			
-.90866972 (-.90866972)			
6. B2U ORBITALS, COMBINED (1) (13 - 13)			
-.42023772 (-.42023772)			
7. EG ORBITALS, COMBINED (2) (14 - 15)			
-.63431260 (-.63431260)	-.63431260 (-.63431260)		
8. EU ORBITALS, COMBINED (10) (16 - 25)			
-15.97045309 (-15.97045309)	-15.97045309 (-15.97045309)	-2.94794013 (-2.94794013)	-2.94794013 (-2.94794013)
-1.36249158 (-1.36249158)	-1.36249158 (-1.36249158)	-.87648721 (-.87648721)	-.87648721 (-.87648721)
-.41538926 (-.41538926)	-.41538926 (-.41538926)		
COMPUTED ENERGY ELAPSED TIME = .096 SECONDS			
FINISHED SCF ELAPSED TIME = .773 SECONDS			

Tableau 43

Données pour PA41 du fragment $Mg^{2+}N_4$ dans une base minimum.

MG(2+)N4,04H,MG(2+)=(33/3)={11/11},N={33/3)={11/11},PA41																			
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0																			
MGINT																			
20 20																			
3 A1G 4																			
1 1.0																			
5 0.25 9 0.25 13 0.25 17 0.25																			
6 0.25 11 0.25 14 -0.25 19 -0.25																			
1 A2G 4																			
7 0.25 10 -0.25 15 -0.25 18 0.25																			
2 A2U 4																			
4 1.0																			
8 0.25 12 0.25 16 0.25 20 0.25																			
2 B1G 4																			
5 0.25 9 -0.25 13 0.25 17 -0.25																			
6 0.25 11 -0.25 14 -0.25 19 0.25																			
1 B2G 4																			
7 0.25 10 0.25 15 -0.25 18 -0.25																			
1 B2U 4																			
8 0.25 12 -0.25 16 0.25 20 -0.25																			
2 EG 4																			
8 0.5 16 -0.5																			
12 0.5 20 -0.5																			
8 EU 4																			
2 1.0																			
3 1.0																			
5 0.5 13 -0.5																			
9 0.5 17 -0.5																			
6 0.5 14 0.5																			
10 0.5 18 0.5																			
7 0.5 15 0.5																			
11 0.5 19 0.5																			
2 1 1 1 2 1 1 1 2 1 1 1 2 1 1 1 2 1 1 1																			
5																			
1.0 0.0 1.0 0.0 1.0 0.0																			
1.0 0.0 0.0 0.0																			
1																			
1.0 0.0																			
2																			
1.0 0.0 1.0 0.0																			
3																			
1.0 0.0 1.0 0.0 0.0 0.0																			
1																			
1.0 0.0																			
1																			
0.0 0.0																			
2																			
0.0 0.5 0.0 0.5																			
10																			
1.0 0.0 1.0 0.0 1.0 0.0																			
1.0 0.0 1.0 0.0 1.0 0.0																			
1.0 0.0 1.0 0.0 0.0 0.0																			
0.0 0.0																			
0.0 -2.0 0.5																			
.0000000001 .00000001																			
2 50 50 1 0 0																			

Tableau 44
Energies relatives à l'itération 28 pour $Mg^{2+}N_4$.

MG(2+)N4,D4H,MG(2+)=(33/3)=[11/1],N=(33/3)=[11/1],PA41 PA41-SINGLE-HAMILTONIAN-OPEN-SHELL-HARTREE-FOCK-LCAO-MO-SCF-PACKAGE RESULTS OF ITERATION 28			
	PRESENT ITERATION	PREVIOUS ITERATION	CHANGE
KINETIC ENERGY, T =	413.6401484772	413.6401484783	-0.000000010
ONE ELECTRON POTENTIAL ENERGY, V(1) =	-1232.9329091512	-1232.9329091940	.0000000428
ONE ELECTRON ENERGY, H = T+V(1) =	-819.2927606740	-819.2927607157	.0000000417
TWO ELECTRON POTENTIAL ENERGY, V(1,2) =	-272.1305205592	-272.1305206010	-0.0000000418
ELECTRONIC POTENTIAL ENERGY, V(E) = V(1)+V(1,2) =	-960.8023885920	-960.8023885930	.0000000010
ELECTRONIC ENERGY, E(E) = H+V(1,2) =	-547.1622401148	-547.1622401147	-0.0000000001
NUCLEAR-REPULSION ENERGY, V(N) =	134.3234810448	134.3234810448	
POTENTIAL ENERGY, V = V(E)+V(N) =	-826.4789075473	-826.4789075482	.0000000010
VIRIAL, -V/T =	1.9980625928	1.9980625928	
TOTAL ENERGY, E = E(E)+V(N) =	-412.8387590700	-412.8387590700	-0.0000000001
ORBITAL ENERGIES (VALUES OF PREVIOUS ITERATION IN PARENTHESES)			
1. A1G ORBITALS, COMBINED (5) (1 - 5)			
-49.38436433 (-49.38436433)	-15.97446727 (-15.97446727)	-4.44969036 (-4.44969035)	-1.38978700 (-1.38978700)
-.45185022 (-.45185022)			
2. A2G ORBITALS, COMBINED (1) (6 - 6)			
-.84482735 (-.84482735)			
3. A2U ORBITALS, COMBINED (2) (7 - 8)			
-2.94195194 (-2.94195193)	-.44278925 (-.44278924)		
4. B1G ORBITALS, COMBINED (3) (9 - 11)			
-15.97517899 (-15.97517899)	-1.34415737 (-1.34415737)	-.39228462 (-.39228462)	
5. B2G ORBITALS, COMBINED (1) (12 - 12)			
-.91056287 (-.91056287)			
6. B2U ORBITALS, COMBINED (1) (13 - 13)			
-.83037487 (-.83037487)			
7. EG ORBITALS, COMBINED (2) (14 - 15)			
-.63546605 (-.63546605)	-.63546605 (-.63546605)		
8. EU ORBITALS, COMBINED (10) (16 - 25)			
-15.97481112 (-15.97481112)	-15.97481112 (-15.97481112)	-2.94557610 (-2.94557603)	-2.94557610 (-2.94557609)
-1.36411657 (-1.36411657)	-1.36411657 (-1.36411657)	-.87807548 (-.87807547)	-.87807548 (-.87807547)
-.41708648 (-.41708648)	-.41708648 (-.41708648)		
COMPUTED ENERGY ELAPSED TIME = .095 SECONDS			
FINISHED SCF ELAPSED TIME = .792 SECONDS			

Tableau 45
OM de l'itération 28 pour $Mg^{2+}N_4$.

MG(2+)N4,D4H,MG(2+)=(33/3),N=(33/3),PA41										
COMBINED ORBITALS										
ITERATION 28										
ROW	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
1A1G	-49.3843643	1.000000								
1	.9903091	.0398551	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.0000960	-.0005220	.0010034	0.0000000	0.0000000
	.0000960	-.0005220	0.0000000	.0010034	0.0000000	.0000960	-.0005220	-.0010034	0.0000000	0.0000000
	.0000960	-.0005220	0.0000000	-.0010034	0.0000000					
2A1G	-15.9744673	1.000000								
2	-.0002634	.0013803	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.4964274	-.0166712	-.0005618	0.0000000	0.0000000
	-.4964274	-.0166712	0.0000000	-.0005618	0.0000000	-.4964274	-.0166712	.0005618	0.0000000	0.0000000
	-.4964274	-.0166712	0.0000000	.0005618	0.0000000					
3A1G	-4.4496984	1.000000								
3	.2689966	-1.0250284	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.0004096	-.0016788	.0016425	0.0000000	0.0000000
	.0004096	-.0016788	0.0000000	.0016425	0.0000000	.0004096	-.0016788	-.0016425	0.0000000	0.0000000
	.0004096	-.0016788	0.0000000	-.0016425	0.0000000					
4A1G	-1.3897870	1.000000								
4	-.0115324	.0613255	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.1144510	-.4959628	.0677144	0.0000000	0.0000000
	.1144510	-.4959628	0.0000000	.0677144	0.0000000	.1144510	-.4959628	-.0677144	0.0000000	0.0000000
	.1144510	-.4959628	0.0000000	-.0677144	0.0000000					
5A1G	-.4518502									
5	.0154338	-.0824043	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.0192761	-.0835129	-.4864728	0.0000000	0.0000000
	.0192761	-.0835129	0.0000000	-.4864728	0.0000000	.0192761	-.0835129	.4864728	0.0000000	0.0000000
	.0192761	-.0835129	0.0000000	.4864728	0.0000000					
1A2G	-.8448273	1.000000								
6	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.5113586	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	-.5113586	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.5113586	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	.5113586	0.0000000	0.0000000					
1A2U	-2.9419519	1.000000								
7	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.9999201	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.0025998
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.0025998	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.0025998
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.0025998					
2A2U	-.4427892	1.000000								
8	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.0179149	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.4976351
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.4976351	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.4976351
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.4976351					
1B1G	-15.9751790	1.000000								
9	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.4962603	-.0175144	.0003620	0.0000000	0.0000000
	.4962603	.0175144	0.0000000	-.0003620	0.0000000	-.4962603	-.0175144	-.0003620	0.0000000	0.0000000
	.4962603	.0175144	0.0000000	.0003620	0.0000000					
2B1G	-1.3441574	1.000000								
10	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.1185873	-.5160398	.0573780	0.0000000	0.0000000
	-.1185873	.5160398	0.0000000	-.0573780	0.0000000	.1185873	-.5160398	-.0573780	0.0000000	0.0000000
	-.1185873	.5160398	0.0000000	.0573780	0.0000000					
3B1G	-.3922846									
11	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.0097176	.0409410	.5081532	0.0000000	0.0000000
	.0097176	-.0409410	0.0000000	-.5081532	0.0000000	-.0097176	.0409410	-.5081532	0.0000000	0.0000000
	.0097176	-.0409410	0.0000000	.5081532	0.0000000					

Tableau 45 (suite)

182G	- .9105629	1.00000								
12	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.4893918	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	.4893918	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.4893918	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	-.4893918	0.0000000	0.0000000					
182U	- .8303741									
13	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.5024054
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.5024054	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.5024054
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.5024054					
1EG	- .6354661									
14	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.7071261	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.7071261					
2EG	- .6354661									
15	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.7071261
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.7071261
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000					
1EU	-15.9748111	1.00000								
16	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.0007940	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.0006650	0.0000000
	-.7019381	-.0241638	0.0000000	-.0001403	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.0006650	0.0000000
	.7019381	.0241638	0.0000000	-.0001403	0.0000000					
2EU	-15.9748111	1.00000								
17	0.0000000	0.0000000	.0007940	0.0000000	0.0000000	-.7019381	-.0241638	-.0001403	0.0000000	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	.0006650	0.0000000	0.0000000	.7019381	.0241638	-.0001403	0.0000000	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	.0006650	0.0000000	0.0000000					
3EU	-2.9455761	1.00000								
18	0.0000000	0.0000000	-.9977995	0.0000000	0.0000000	.0033186	-.0141696	.0149968	0.0000000	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	-.0028139	0.0000000	0.0000000	-.0033186	.0141696	.0149968	0.0000000	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	-.0028139	0.0000000	0.0000000					
4EU	-2.9455761	1.00000								
19	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.9977995	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.0028139	0.0000000
	.0033186	-.0141696	0.0000000	.0149968	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.0028139	0.0000000
	-.0033186	.0141696	0.0000000	.0149968	0.0000000					
5EU	-1.3641166	1.00000								
20	0.0000000	0.0000000	.0562026	0.0000000	0.0000000	.1645473	-.7145613	.0871720	0.0000000	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	-.0240791	0.0000000	0.0000000	-.1645473	.7145613	.0871720	0.0000000	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	-.0240791	0.0000000	0.0000000					
6EU	-1.3641166	1.00000								
21	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.0562026	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.0240791	0.0000000
	.1645473	-.7145613	0.0000000	.0871720	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.0240791	0.0000000
	-.1645473	.7145613	0.0000000	.0871720	0.0000000					
7EU	-.8780755	1.00000								
22	0.0000000	0.0000000	.0145550	0.0000000	0.0000000	-.0125501	.0554765	.0345834	0.0000000	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	-.7047634	0.0000000	0.0000000	-.0125501	-.0554765	.0345834	0.0000000	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	-.7047634	0.0000000	0.0000000					
8EU	-.8780755	1.00000								
23	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.0145550	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.7047634	0.0000000
	.0125501	-.0554765	0.0000000	-.0345834	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.7047634	0.0000000
	-.0125501	.0554765	0.0000000	-.0345834	0.0000000					
9EU	-.4170865									
24	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.0710831	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.0619654	0.0000000
	.0195357	-.0838040	0.0000000	-.7026044	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.0619654	0.0000000

Tableau 46
Analyse de population de Mulliken pour Mg^{2+}N_4 .

MULLIKEN POPULATION ANALYSIS												
MG(2+)N4,D4H,MG(2+)=(33/3),N=(33/3),PA59												
			1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
MG(2+) S	1	A1G	1.97914	.00000	.02077	.00003	.00006					
		TOTAL IN A1G	1.99994									
MG(2+) S	2	A1G	.02090	-.00000	1.97832	.00041	.00037					
		TOTAL IN A1G	1.99963									
MG(2+) X	3	EU	0.00000	-.00000	1.99474	0.00000	.00251	0.00000	.00014	0.00000	0.00000	.00261
		TOTAL IN EU		1.99739								
MG(2+) Y	4	EU	-.00000	0.00000	0.00000	1.99474	0.00000	.00251	0.00000	.00014	.00261	0.00000
		TOTAL IN EU		1.99739								
MG(2+) Z	5	A2U	1.99981	.00019								
		TOTAL IN A2U	2.00000									
MG(2+) TOTAL IN A1G		ON MG(2+)	3.99957									
TOTAL IN A2G		ON MG(2+)	0.00000									
TOTAL IN A2U		ON MG(2+)	2.00000									
TOTAL IN B1G		ON MG(2+)	0.00000									
TOTAL IN B2G		ON MG(2+)	0.00000									
TOTAL IN B2U		ON MG(2+)	0.00000									
TOTAL IN EG		ON MG(2+)	0.00000									
TOTAL IN EU		ON MG(2+)	3.99479									
		TOTAL ON MG(2+)	9.99436									

Tableau 46 (suite)

MULLIKEN POPULATION ANALYSIS										
MG(2+)N4,D4H,MG(2+)= (33/3),N=(33/3),PA59										
			1	2	3	4	5	6	7	8
N1	S	6	A1G	-.00000	.49615	.00000	.00374	.00011		
			TOTAL IN A1G	.49989						
			B1G	.49598	.00399	.00003				
			TOTAL IN B1G	.49997						
			EU	0.00000	.99213	.00000	0.00000	.00770	0.00000	.00000
			TOTAL IN EU	.99988						
			TOTAL	1.99974						
N1	S	7	A1G	-.00000	.00385	.00008	.48472	.01135		
			TOTAL IN A1G	.48865						
			B1G	.00402	.49157	.00441				
			TOTAL IN B1G	.49559						
			EU	0.00000	.00787	.00091	0.00000	.97380	0.00000	.00340
			TOTAL IN EU	.98597						
			TOTAL	1.97021						
N1	X	8	A1G	-.00001	.00000	.00015	.01143	.48843		
			TOTAL IN A1G	.01157						
			B1G	-.00000	.00444	.49556				
			TOTAL IN B1G	.00444						
			EU	0.00000	.00000	.00166	0.00000	.01465	0.00000	.00402
			TOTAL IN EU	.02053						
			TOTAL	.03654						
N1	Y	9	A2G	.50000						
			TOTAL IN A2G	.50000						
			B2G	.50000						
			TOTAL IN B2G	.50000						
			EU	-.00000	0.00000	0.00000	.00006	0.00000	.00239	0.00000
			TOTAL IN EU	.99491						
			TOTAL	1.99491						
N1	Z	10	A2U	.00005	.49995					
			TOTAL IN A2U	.50000						
			EG	0.00000	1.00000					
			TOTAL IN EG	.50000						
			TOTAL	1.00000						
N1	TOTAL IN A1G		ON N1	1.00011						
	TOTAL IN A2G		ON N1	.50000						
	TOTAL IN A2U		ON N1	.50000						
	TOTAL IN B1G		ON N1	1.00000						
	TOTAL IN B2G		ON N1	.50000						
	TOTAL IN B2U		ON N1	0.00000						
	TOTAL IN EG		ON N1	.50000						
	TOTAL IN EU		ON N1	3.00130						
	TOTAL ON N1			7.00141						

Tableau 46 (suite)

MULLIKEN POPULATION ANALYSIS													
HG(2+)N4, D4H, HG(2+)=(33/3), N=(33/3), PA59													
				1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
N2	S	11	A1G	-.00000	.49615	.00000	.00374	.60011					
			TOTAL IN A1G		.49989								
			B1G	.49598	.00399	.00003							
			TOTAL IN B1G		.49997								
			EU	.99213	0.00000	0.00000	.00000	0.00000	.00776	0.00000	.00004	.00012	0.00000
			TOTAL IN EU		.99988								
			TOTAL		1.99974								
N2	S	12	A1G	-.00000	.00385	.00008	.48472	.01135					
			TOTAL IN A1G		.48865								
			B1G	.00402	.49157	.00441							
			TOTAL IN B1G		.49559								
			EU	.00787	0.00000	0.00000	.00091	0.00000	.97380	0.00000	.00340	.01403	0.00000
			TOTAL IN EU		.98597								
			TOTAL		1.97021								
N2	X	13	A2G	.50000									
			TOTAL IN A2G		.50000								
			B2G	.50000									
			TOTAL IN B2G		.50000								
			EU	0.00000	-.00000	.00006	0.00000	.00239	0.00000	-.99247	0.00000	0.00000	.00509
			TOTAL IN EU		.99491								
			TOTAL		1.99491								
N2	Y	14	A1G	-.00001	.00000	.00015	.01143	.48843					
			TOTAL IN A1G		.01157								
			B1G	-.00000	.00444	.49556							
			TOTAL IN B1G		.00444								
			EU	.00000	0.00000	0.00000	.00166	0.00000	.01485	0.00000	.00402	.97947	0.00000
			TOTAL IN EU		.02053								
			TOTAL		.03654								
N2	Z	15	A2U	.00005	.49995								
			TOTAL IN A2U		.50000								
			EG	1.00000	0.00000								
			TOTAL IN EG		.50000								
			TOTAL		1.00000								
N2	TOTAL IN A1G		ON N2	1.00011									
	TOTAL IN A2G		ON N2	.50000									
	TOTAL IN A2U		ON N2	.50000									
	TOTAL IN B1G		ON N2	1.00000									
	TOTAL IN B2G		ON N2	.50000									
	TOTAL IN B2U		ON N2	0.00000									
	TOTAL IN EG		ON N2	.50000									
	TOTAL IN EU		ON N2	3.00130									
	TOTAL ON N2			7.60141									

Tableau 46 (suite)

MULLIKEN POPULATION ANALYSIS													
MG(2+)N4,D4H,MG(2+)=(33/3),N=(33/3),PA59													
				1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
N3	S	16	A1G	-.00000	.49615	.00000	.00374	.00011					
			TOTAL IN A1G		.49989								
			B1G	.49598	.00399	.00003							
			TOTAL IN B1G		.49997								
			EU	0.00000	.99213	.00000	0.00000	.00770	0.00000	.00004	0.00000	0.00000	.00012
			TOTAL IN EU		.99988								
			TOTAL		1.99974								
N3	S	17	A1G	-.00000	.00385	.00008	.48472	.01135					
			TOTAL IN A1G		.48865								
			B1G	.00402	.49157	.00441							
			TOTAL IN B1G		.49559								
			EU	0.00000	.00787	.00091	0.00000	.97380	0.00000	.00340	0.00000	0.00000	.01403
			TOTAL IN EU		.98597								
			TOTAL		1.97021								
N3	X	18	A1G	-.00001	.00000	.00015	.01143	.48843					
			TOTAL IN A1G		.01157								
			B1G	-.00000	.00444	.49556							
			TOTAL IN B1G		.00444								
			EU	0.00000	.00000	.00166	0.00000	.01485	0.00000	.00402	0.00000	0.00000	.97947
			TOTAL IN EU		.02053								
			TOTAL		.03654								
N3	Y	19	A2G	.50000									
			TOTAL IN A2G		.50000								
			B2G	.50000									
			TOTAL IN B2G		.50000								
			EU	-.00000	0.00000	0.00000	.03006	0.00000	.00239	0.00000	.99247	.00509	0.00000
			TOTAL IN EU		.99491								
			TOTAL		1.99491								
N3	Z	20	A2U	.00005	.49995								
			TOTAL IN A2U		.50000								
			EG	0.00000	1.00000								
			TOTAL IN EG		.50000								
			TOTAL		1.00000								
N3	TOTAL IN A1G			ON N3	1.00011								
	TOTAL IN A2G			ON N3	.50000								
	TOTAL IN A2U			ON N3	.50000								
	TOTAL IN B1G			ON N3	1.00000								
	TOTAL IN B2G			ON N3	.50000								
	TOTAL IN B2U			ON N3	1.00000								
	TOTAL IN EG			ON N3	.50000								
	TOTAL IN EU			ON N3	3.00130								
	TOTAL ON N3				7.00141								

Tableau 46 (suite)

MULLIKEN POPULATION ANALYSIS													
MG(2+)N4,D4H,MG(2+)=(33/3),N=(33/3),PA59													
				1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
N4	S	21	A1G	-.00000	.49615	.00000	.00374	.00011					
			TOTAL IN A1G		.49989								
			B1G	.49598	.00399	.00003							
			TOTAL IN B1G		.49997								
			EU	.99213	0.00000	0.00000	.00000	0.00000	.00770	0.00000	.00004	.00012	0.00000
			TOTAL IN EU		.99988								
			TOTAL		1.99974								
N4	S	22	A1G	-.00000	.00385	.00008	.48472	.01135					
			TOTAL IN A1G		.48865								
			B1G	.00402	.49157	.00441							
			TOTAL IN B1G		.49559								
			EU	.00787	0.00000	0.00000	.00091	0.00000	.97380	0.00000	.00340	.01403	0.00000
			TOTAL IN EU		.98597								
			TOTAL		1.97021								
N4	X	23	A2G	.50000									
			TOTAL IN A2G		.50000								
			B2G	.50000									
			TOTAL IN B2G		.50000								
			EU	0.00000	-.00000	.00006	0.00000	.00239	0.00000	.99247	0.00000	0.00000	.00509
			TOTAL IN EU		.99491								
			TOTAL		1.99491								
N4	Y	24	A1G	-.00001	.00000	.00015	.01143	.48843					
			TOTAL IN A1G		.01157								
			B1G	-.00000	.00444	.49556							
			TOTAL IN B1G		.00444								
			EU	.00000	0.00000	0.00000	.00166	0.00000	.01485	0.00000	.00402	.97947	0.00000
			TOTAL IN EU		.02053								
			TOTAL		.03654								
N4	Z	25	A2U	.00005	.49995								
			TOTAL IN A2U		.50000								
			EG	1.00000	0.00000								
			TOTAL IN EG		.50000								
			TOTAL		1.00000								
N4	TOTAL IN A1G		ON N4	1.00011									
	TOTAL IN A2G		ON N4	.50000									
	TOTAL IN A2U		ON N4	.50000									
	TOTAL IN B1G		ON N4	1.00000									
	TOTAL IN B2G		ON N4	.50000									
	TOTAL IN B2U		ON N4	.50000									
	TOTAL IN EG		ON N4	.50000									
	TOTAL IN EU		ON N4	3.00130									
	TOTAL ON N4			7.00141									

CONSIDER OVERLAPS IN BONDS LESS THAN 7.7970000 AU LONG

Tableau 47
Analyse de population de recouvrement pour $Mg^{2+}N_4$.

MG(2+)N4,04H,MG(2+)=(33/3),N=(33/3),PA59										
OVERLAP POPULATIONS										
PAGE 1										
1. FROM A1G	MOLECULAR ORBITALS									
	N1	N2	N2	N3	N3	N3	N4	N4	N4	N4
	MG(2+)	MG(2+)	N1	MG(2+)	N1	N2	MG(2+)	N1	N2	N3
3A1G	.00043	.00043	.00000	.00043	.00000	.00000	.00043	.00000	.00000	.00000
4A1G	-.00335	-.00335	.01875	-.00335	.00066	.01875	-.00335	.01875	.00066	.01875
TOTAL FROM A1G	-.00294	-.00294	.01878	-.00294	.00066	.01878	-.00294	.01878	.00066	.01878
2. FROM A2G	MOLECULAR ORBITALS									
	N1	N2	N2	N3	N3	N3	N4	N4	N4	N4
	MG(2+)	MG(2+)	N1	MG(2+)	N1	N2	MG(2+)	N1	N2	N3
1A2G	0.00000	0.00000	-.02295	0.00000	-.00006	-.02295	0.00000	-.02295	-.00006	-.02295
TOTAL FROM A2G	0.00000	0.00000	-.02295	0.00000	-.00006	-.02295	0.00000	-.02295	-.00006	-.02295
3. FROM A2U	MOLECULAR ORBITALS									
	N1	N2	N2	N3	N3	N3	N4	N4	N4	N4
	MG(2+)	MG(2+)	N1	MG(2+)	N1	N2	MG(2+)	N1	N2	N3
1A2U	.00007	.00007	.00000	.00007	.00000	.00000	.00007	.00000	.00000	.00000
2A2U	-.00023	-.00023	.00476	-.00023	.00005	.00476	-.00023	.00476	.00005	.00476
TOTAL FROM A2U	-.00016	-.00016	.00476	-.00016	.00005	.00476	-.00016	.00476	.00005	.00476
4. FROM B1G	MOLECULAR ORBITALS									
	N1	N2	N2	N3	N3	N3	N4	N4	N4	N4
	MG(2+)	MG(2+)	N1	MG(2+)	N1	N2	MG(2+)	N1	N2	N3
2B1G	0.00000	0.00000	-.01929	0.00000	.00067	-.01929	0.00000	-.01929	.00067	-.01929
TOTAL FROM B1G	0.00000	0.00000	-.01932	0.00000	.00067	-.01932	0.00000	-.01932	.00067	-.01932
5. FROM B2G	MOLECULAR ORBITALS									
	N1	N2	N2	N3	N3	N3	N4	N4	N4	N4
	MG(2+)	MG(2+)	N1	MG(2+)	N1	N2	MG(2+)	N1	N2	N3
1B2G	0.00000	0.00000	.02102	0.00000	-.00005	.02102	0.00000	.02102	-.00005	.02102
TOTAL FROM B2G	0.00000	0.00000	.02102	0.00000	-.00005	.02102	0.00000	.02102	-.00005	.02102
6. FROM B2U	MOLECULAR ORBITALS									
	N1	N2	N2	N3	N3	N3	N4	N4	N4	N4
	MG(2+)	MG(2+)	N1	MG(2+)	N1	N2	MG(2+)	N1	N2	N3
TOTAL FROM B2U	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
7. FROM EG	MOLECULAR ORBITALS									
	N1	N2	N2	N3	N3	N3	N4	N4	N4	N4
	MG(2+)	MG(2+)	N1	MG(2+)	N1	N2	MG(2+)	N1	N2	N3
1EG	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
2EG	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	-.00005	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
TOTAL FROM EG	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	-.00005	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
8. FROM EU	MOLECULAR ORBITALS									
	N1	N2	N2	N3	N3	N3	N4	N4	N4	N4
	MG(2+)	MG(2+)	N1	MG(2+)	N1	N2	MG(2+)	N1	N2	N3
3EU	.00346	.00007	.00001	.00346	-.00000	.00001	.00007	.00001	.00000	.00001
4EU	.00007	.00346	.00001	.00007	.00000	.00001	.00346	.00001	-.00000	.00001
5EU	-.00377	-.00003	.00125	-.00377	-.00132	.00125	-.00003	.00125	.00000	.00125

Tableau 47 (suite)

6EU	-.00003	-.00377	.00125	-.00003	.00000	.00125	-.00377	.00125	-.00132	.00125
7EU	-.00002	-.00026	-.00084	-.00002	.00000	-.00084	-.00026	-.00084	.00011	-.00084
8EU	-.00026	-.00002	-.00084	-.00026	.00011	-.00084	-.00002	-.00084	.00000	-.00084
TOTAL FROM EU	-.00056	-.00056	.00083	-.00056	-.00121	.00083	-.00056	.00083	-.00121	.00083
TOTAL FROM ALL MOLECULAR ORBITALS										
	N1	N2	N2	N3	N3	N3	N4	N4	N4	N4
	MG(2+)	MG(2+)	N1	MG(2+)	N1	N2	MG(2+)	N1	N2	N3
OVERLAP CHARGE	-.00366	-.00366	.00312	-.00366	.00001	.00312	-.00366	.00312	.00001	.00312
DISTANCE (AU)	3.89800	3.89800	5.51260	3.89800	7.79600	5.51260	3.89800	5.51260	7.79600	5.51260

Tableau 48

Données pour PA20A du fragment $Mg^{2+}N_4$ dans une base de VD.

MG(2+)N4, D4H, MG(2+)=112/21/1*, N=112/21, PA20A	
1 2	1
MGNLST	
26 51	
3 2 2 2 1 1 1 1 1 1 3 2 2 2 3 2 2 2 3 2 2 2 3 2	
2 2	
15 15	
1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1	
-2 3 -3 2 -2 3 -3 -2 2 3 -3 2 -2 3 -3	
-3 -2 2 -3 3 2 -2 -3 3 -2 2 -3 3 2 -2	
4 4 4 -4 -4 -4 -4 -4 -4 -4 -4 -4 -4 -4 -4	
5 6 6 5 5 6 6 5 5 6 6 5 5 6 6	
6 5 5 6 6 5 5 6 6 5 5 6 6 5 5	
7 7 7 7 7 7 7 7 7 7 7 7 7 7 7	
8 -8 -8 -8 -8 8 8 8 8 -8 -8 -8 -8 8 8	
-9 10 -10 -9 9 -10 10 9 -9 -10 10 9 -9 10 -10	
-10 -9 9 10 -10 -9 9 10 -10 9 -9 -10 10 9 -9	
19 15 23 11 19 15 23 19 11 15 23 11 19 15 23	
-20 17 -25 12 -20 17 -25 20 12 17 -25 12 -20 17 -25	
-21 -16 24 -13 21 16 -24 -21 13 -16 24 -13 21 16 -24	
22 18 26 -14 -22 -18 -26 -22 -14 -18 -26 14 22 18 26	
23 19 11 23 15 11 19 23 15 19 11 23 15 11 19	
-24 21 -13 24 -16 13 -21 -24 16 21 -13 24 -16 13 -21	
-25 -20 12 -25 17 12 -20 -25 17 -20 12 -25 17 12 -20	
26 22 14 -26 -18 -14 -22 -26 -18 -22 -14 26 18 14 22	
11 23 15 19 11 23 15 11 19 23 15 19 11 23 15	
-12 25 -17 20 -12 25 -17 -12 20 25 -17 20 -12 25 -17	
-13 -24 16 -21 13 24 -16 -13 21 -24 16 -21 13 24 -16	
14 26 18 -22 -14 -26 -18 -14 -22 -26 -18 22 14 26 18	
15 11 19 15 23 19 11 15 23 11 19 15 23 19 11	
-16 13 -21 16 -24 21 -13 -16 24 13 -21 16 -24 21 -13	
-17 -12 20 -17 25 20 -12 -17 25 -12 20 -17 25 20 -12	
18 14 22 -18 -26 -22 -14 -18 -26 -14 -22 18 26 22 14	

Tableau 49
Données pour PA30A du fragment $Mg^{2+}N_4$ dans une base de VD.

MG(2+)N4, D4H, MG(2+)=(321/211*), N=(321/21), PA30A				
2 0 0	1			
MGNLST	MGINT			
5				
MG(2+)	0.0	0.0	0.0	12.0
N1	3.898	0.0	0.0	7.0
N2	0.0	3.898	0.0	7.0
N3	-3.898	0.0	0.0	7.0
N4	0.0	-3.898	0.0	7.0
01 51				
3 2 1 2 1 2 1 2 1 1 1 1 1 1 3 2 1 2 1 2 1 2 1 3 2 1 2 1 2 1 3 2 1				
2 1 2 1 2 1 3 2 1 2 1 2 1 2 1				
MG(2+)	S	654.89097	0.0675674	
MG(2+)	S	98.727577	0.3901195	
MG(2+)	S	21.335201	0.6683850	
MG(2+)	S	28.128657	-0.0863368	
MG(2+)	S	2.2951125	0.5978077	
MG(2+)	S	0.79975294	1.0000000	
MG(2+)	X	23.805108	0.1182192	
MG(2+)	X	5.1165930	0.4748816	
MG(2+)	X	1.2313920	1.0000000	
MG(2+)	Y	4		
MG(2+)	Y	5		
MG(2+)	Z	4		
MG(2+)	Z	5		
MG(2+)	XX	3.444	1.0000000	
MG(2+)	YY	10		
MG(2+)	ZZ	10		
MG(2+)	XY	10		
MG(2+)	XZ	10		
MG(2+)	YZ	10		
N1	S	218.36449	0.0678703	
N1	S	32.598890	0.3902018	
N1	S	6.9173900	0.6706832	
N1	S	8.3263800	-0.0808903	
N1	S	0.65919000	0.5672020	
N1	S	0.21009000	1.0000000	
N1	X	6.1203500	0.1159195	
N1	X	1.2593800	0.4699582	
N1	X	0.29145000	1.0000000	
N1	Y	19		
N1	Y	20		
N1	Z	19		
N1	Z	20		
N2	S	16		
N2	S	17		
N2	S	18		
N2	X	19		
N2	X	20		
N2	Y	19		
N2	Y	20		
N2	Z	19		
N2	Z	20		
N3	S	16		
N3	S	17		
N3	S	18		
N3	X	19		
N3	X	20		
N3	Y	19		
N3	Y	20		
N3	Z	19		
N3	Z	20		
N4	S	16		
N4	S	17		

Tableau 50
Données pour PA40 du fragment Mg^{2+}N_k dans une base de VD.

MG(2+)N4,D4H,MG(2+)=(321/21/1*),N=(321/21),PA40																			
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0																			
MGINT																			
26 26																			
5 A1G 4																			
1 1.0																			
7 1.0																			
5 0.5 6 0.5																			
11 0.25 15 0.25 19 0.25 23 0.25																			
12 0.25 17 0.25 20 -0.25 25 -0.25																			
1 A2G 4																			
13 0.25 16 -0.25 21 -0.25 24 0.25																			
2 A2U 4																			
4 1.0																			
14 0.25 18 0.25 22 0.25 26 0.25																			
3 B1G 4																			
5 0.5 6 -0.5																			
11 0.25 15 -0.25 19 0.25 23 -0.25																			
12 0.25 17 -0.25 20 -0.25 25 0.25																			
2 B2G 4																			
4 1.0																			
13 0.25 16 0.25 21 -0.25 24 -0.25																			
1 B2U 4																			
14 0.25 18 -0.25 22 0.25 26 -0.25																			
4 EG 4																			
9 1.0																			
10 1.0																			
14 0.5 22 -0.5																			
18 0.5 26 -0.5																			
4 EU 4																			
2 1.0																			
3 1.0																			
11 0.5 19 -0.5																			
15 0.5 23 -0.5																			
12 0.5 20 0.5																			
16 0.5 24 0.5																			
13 0.5 21 0.5																			
17 0.5 25 0.5																			
3 2 2 2 1 1 1 1 1 3 2 2 2 3 2 2 2 3 2 2 3 2																			
2 2																			
7																			
1.0 1.0 1.0 1.0 0.0 0.0																			
0.0																			
1																			
1.0																			
2																			
1.0 0.0																			
4																			
1.0 1.0 0.0 0.0																			
2																			
1.0 0.0																			
1																			
0.0																			
4																			
1.0 1.0 0.0 0.0																			
10																			
1.0 1.0 1.0 1.0 1.0 1.0																			
1.0 1.0 0.0 0.0																			
.0000000001 .00000001																			
2 150 150 1 0 0																			

Tableau 51
Energies relatives à l'itération 33 pour $Mg^{2+}N_4$.

MG(2+)N4,D4H,MG(2+)=(321/21/1*),N=(321/21),PA40							
PA40 CLOSED SHELL HARTREE-FOCK SELF-CONSISTENT-FIELD L.C.A.O. METHOD							
RESULTS OF ITERATION 33							
	PRESENT ITERATION	PREVIOUS ITERATION	CHANGE				
KINETIC ENERGY, T =	400.1810211532	400.1810209704	.0000001828				
ONE ELECTRON POTENTIAL ENERGY, V(1) =	-1226.7539916044	-1226.7539911041	-.0000005003				
ONE ELECTRON ENERGY, H = T+V(1) =	-818.5729704513	-818.5729701337	-.0000003176				
TWO ELECTRON POTENTIAL ENERGY, V(1,2) =	271.3979065613	271.3979062438	.0000003175				
ELECTRONIC POTENTIAL ENERGY, V(E) = V(1)+V(1,2) =	-955.3560850431	-955.3560848603	-.0000001828				
ELECTRONIC ENERGY, E(E) = H+V(1,2) =	-547.1750630900	-547.1750630099	-.0000000800				
NUCLEAR REPULSION ENERGY, V(N) =	134.3234010440	134.3234010440					
POTENTIAL ENERGY, V = V(E)+V(N) =	-821.0326039983	-821.0326030155	-.0000001828				
VIRIAL, -V/T =	2.0114423704	2.0114423700					
TOTAL ENERGY, E = E(E)+V(N) =	-412.0515020452	-412.0515020451	-.0000000000				
ORBITAL ENERGIES (VALUES OF PREVIOUS ITERATION IN PARENTHESES)							
1. A1G ORBITALS, (10) (1 - 10)							
-49.46113823 (-49.46113823)	-16.06570025 (-16.06570029)	-4.44404706 (-4.44404707)	-1.47165774 (-1.47165777)				
-.40877327 (-.40877330)	.29014361 (.29014359)	.04470726 (.04470725)	2.01759492 (2.01759491)				
6.16823012 (6.16823012)	15.66392030 (15.66392030)						
2. A2G ORBITALS, (2) (11 - 12)							
-.88026096 (-.88026094)	1.10066210 (1.10066210)						
3. A2U ORBITALS, (4) (13 - 16)							
-2.94114100 (-2.94114100)	-.59813760 (-.59813762)	.91804045 (.91804043)	3.74773976 (3.74773976)				
4. B1G ORBITALS, (6) (17 - 22)							
-16.06619357 (-16.06619361)	-1.43266103 (-1.43266105)	-.40539776 (-.40539778)	.61432093 (.61432092)				
1.08682278 (1.08682276)	6.18466717 (6.18466716)						
5. B2G ORBITALS, (3) (23 - 25)							
-.94502897 (-.94502896)	.01681308 (.01681308)	6.16306851 (6.16306851)					
6. B2U ORBITALS, (2) (26 - 27)							
-.57699634 (-.57699636)	.99620322 (.99620320)						
7. EG ORBITALS, (6) (28 - 33)							
-.71302023 (-.71302025)	-.71302023 (-.71302025)	.95615372 (.95615369)	.95615372 (.95615369)				
6.16373090 (6.16373097)	6.16373090 (6.16373097)						
8. EU ORBITALS, (18) (34 - 51)							
-16.06591883 (-16.06591887)	-16.06591883 (-16.06591887)	-2.94402771 (-2.94402771)	-2.94402771 (-2.94402771)				
-1.45140394 (-1.45140396)	-1.45140394 (-1.45140396)	-.91439945 (-.91439944)	-.91439945 (-.91439944)				
-.43644793 (-.43644795)	-.43644793 (-.43644795)	.43253539 (.43253537)	.43253539 (.43253537)				
.09454731 (.09454730)	.09454731 (.09454730)	1.05941215 (1.05941214)	1.05941215 (1.05941214)				
3.90060613 (3.90060613)	3.90060613 (3.90060613)						
COMPUTED ENERGY ELAPSED TIME = .125 SECONDS							
FINISHED SCF ELAPSED TIME = .002 SECONDS							

OM de l'itération 33 pour Mg^{2+}N_4 .

[illegible]

Tableau 52 (suite)

0.0000000										
8A1G	2.0175949									
8	-0.0535033	1.4102676	-1.9061872	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.1781794
	.1781794	.1631568	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.0056003	-.1368697	.1597885	.1712701	-.2241889
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.0056003	-.1368697	.1597885	0.0000000	0.0000000	.1712701
	-.2241889	0.0000000	0.0000000	-.0056003	-.1368697	.1597885	-.1712701	.2241889	0.0000000	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	.0056003	-.1368697	.1597885	0.0000000	0.0000000	-.1712701	.2241889	0.0000000
	0.0000000									
9A1G	6.1602301									
9	.0000027	-.0215915	.0261358	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.5007090
	.5007090	-.9993988	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.0002716	.0084869	-.0102462	-.0087429	.0146693
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.0002716	.0084869	-.0102462	0.0000000	0.0000000	-.0087429
	.0146693	0.0000000	0.0000000	-.0002716	.0084869	-.0102462	.0087429	-.0146693	0.0000000	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	-.0002716	.0084869	-.0102462	0.0000000	0.0000000	.0087429	-.0146693	0.0000000
	0.0000000									
10A1G	15.6639284									
10	-.5156607	2.6600042	.9084867	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-1.5578047
	-1.5578047	-1.5631037	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.0003047	.0314794	-.0417675	-.0219539	.0441103
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.0003047	.0314794	-.0417675	0.0000000	0.0000000	-.0219539
	.0441103	0.0000000	0.0000000	-.0003047	.0314794	-.0417675	.0219539	-.0441103	0.0000000	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	-.0003047	.0314794	-.0417675	0.0000000	0.0000000	.0219539	-.0441103	0.0000000
	0.0000000									
1A2G	-1.8802690 1.00000									
11	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	-.2805135	-.3098413	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.2805135	.3098413	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.2805135	.3098413
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.2805135	-.3098413	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	0.0000000									
2A2G	1.1006622									
12	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	.5137661	-.5359082	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.5137661	.5359082	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.5137661	.5359082
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.5137661	-.5359082	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	0.0000000									
1A2U	-2.9411419 1.00000									
13	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.5462264	-.6032919	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	.0009604	-.0047376	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	0.0000000	.0009604	-.0047376	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	.0009604	-.0047376	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.0009604
	-.0047376									
2A2U	-.5981376									
14	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.0162116	.0081512	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	-.2346044	-.3369659	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	0.0000000	-.2346044	-.3369659	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	-.2346044	-.3369659	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.2346044
	-.3369659									
3A2U	.9180405									
15	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.0345558	-.0066544	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	.5239005	-.4561855	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	0.0000000	.5239005	-.4561855	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	.5239005	-.4561855	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.5239005

Tableau 52 (suite)

[illegible]

Tableau 52 (suite)

0.0000000									
5EG	6.1637310								
32	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-1.0000075	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	0.0000000	-0.0056032	-0.0094924	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0056032
	-0.0094924								
6EG	6.1637310								
33	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-1.0000075	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	-0.0056032	-0.0094924	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	0.0056032	-0.0094924	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	0.0000000								
1EU	-16.0659188 1.000000								
34	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-0.0003604	0.0013435	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.6998115	0.0429361	-0.0166199	0.0001767
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-0.0004830	0.0012084
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-0.6998115	-0.0429361	0.0166199	0.0001767	0.0001543	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-0.0004830	0.0012084	0.0000000	0.0000000
	0.0000000								
2EU	-16.0659188 1.000000								
35	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-0.0003604	0.0013435	0.0000000	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	-0.0004830	0.0012084	0.0000000	0.0000000	0.6998115	0.0429361	-0.0166199	0.0000000	0.0001767
	0.0001543	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-0.0004830	0.0012084
	0.0000000	0.0000000	-0.6998115	-0.0429361	0.0166199	0.0000000	0.0000000	0.0001767	0.0001543
	0.0000000								
3EU	-2.9448277 1.000000								
36	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.5440814	0.5994671	0.0000000	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	-0.0001042	0.0020024	0.0000000	0.0000000	-0.0023457	-0.0087103	0.0251827	0.0000000	0.0000000
	-0.0230579	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-0.0001042
	0.0000000	0.0000000	0.0023457	0.0087103	-0.0251827	0.0000000	0.0000000	0.0044192	-0.0230579
	0.0000000								
4EU	-2.9448277 1.000000								
37	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.5440814	0.5994671	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-0.0023457	-0.0087103	0.0251827	0.0044192
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-0.0001042	0.0020024
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-0.0023457	-0.0087103	-0.0251827	0.0044192	-0.0230579	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-0.0001042	0.0020024	0.0000000	0.0000000
	0.0000000								
5EU	-1.4514039 1.000000								
38	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0359010	0.0337903	0.0000000	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	-0.0094650	-0.0116273	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-0.3923905	-0.3600487	0.0000000	0.0000000
	0.0706402	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-0.0094650
	0.0000000	0.0000000	-0.1657480	0.3923905	0.3600487	0.0000000	0.0000000	0.0300702	0.0706402
	0.0000000								
6EU	-1.4514039 1.000000								
39	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0359010	0.0337903	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-0.1657480	-0.3923905	-0.3600487	0.0706402
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-0.0094650	-0.0116273
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-0.1657480	0.3923905	0.3600487	0.0300702	0.0000000	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-0.0094650	-0.0116273	0.0000000	0.0000000

Tableau 53
Analyse de population de Mulliken pour Mg^{2+}N_4 .

MULLIKEN POPULATION ANALYSIS												
MG(2+)N4,D4H,MG(2+)=(321/21/1*),N=(321/21),PA59												
			1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
MG(2+) S	1	A1G	1.96364	-.00000	.02085	.00005	.00017	.00030	.00027	.00233	.00000	.01239
		TOTAL IN A1G		1.98454								
MG(2+) S	2	A1G	.05066	-.00000	1.07622	.00282	.01359	.03465	.04504	.63187	.00006	.14510
		TOTAL IN A1G		1.12970								
MG(2+) S	3	A1G	-.00636	-.00000	.89132	-.00091	.00419	.03131	.06151	1.08548	.00009	-.06661
		TOTAL IN A1G		.88404								
MG(2+) X	4	EU	-.00000	0.00000	0.00000	.92689	0.00000	.00330	0.00000	.00046	0.00000	.00011
		TOTAL IN EU		.93065								
MG(2+) X	5	EU	-.00000	0.00000	0.00000	1.06061	0.00000	-.00001	0.00000	-.00007	0.00000	-.00192
		TOTAL IN EU		1.06053								
MG(2+) Y	6	EU	0.00000	-.00000	.92689	0.00000	.00330	0.00000	.00046	0.00000	.00011	0.00000
		TOTAL IN EU		.93065								
MG(2+) Y	7	EU	0.00000	-.00000	1.06061	0.00000	-.00001	0.00000	-.00007	0.00000	-.00192	0.00000
		TOTAL IN EU		1.06053								
MG(2+) Z	8	A2U	.93398	.00058	.00192	1.06353						
		TOTAL IN A2U		.93398								
MG(2+) Z	9	A2U	1.06548	-.00007	.00022	.93436						
		TOTAL IN A2U		1.06548								
MG(2+) TOTAL IN A1G		ON MG(2+)	4.00024									
TOTAL IN A2G		ON MG(2+)	0.00000									
TOTAL IN A2U		ON MG(2+)	1.99946									
TOTAL IN B1G		ON MG(2+)	.00006									
TOTAL IN B2G		ON MG(2+)	.00003									
TOTAL IN B2U		ON MG(2+)	0.00000									
TOTAL IN EG		ON MG(2+)	.00005									
TOTAL IN EU		ON MG(2+)	3.98236									
TOTAL ON MG(2+)			9.98219									

Tableau 53 (suite)

MULLIKEN POPULATION ANALYSIS											
MG(2+)N4,D4H,MG(2+)= (321/21/1*), N= (321/21), PA59											
				1	2	3	4	5	6	7	8
N1	S	16	A1G	.00000	.49438	.00000	.00386	.00024	.00135	.00015	.00002
			B1G	.49438	.00420	.00003	.00135	.00004	.00000		
			EU	.98877	0.00000	0.00000	.00000	0.00000	.00006	0.00000	.00018
			TOTAL IN EU	.99689							
			TOTAL	1.99371							
N1	S	17	A1G	-.00000	.00755	-.00000	.24151	.02317	.20226	.02273	.00277
			B1G	.00003	.26452	.00235	.21760	.00746	.00005		
			EU	.01550	0.00000	0.00000	-.00024	0.00000	.50687	0.00000	.01669
			TOTAL IN EU	.52757							
			TOTAL	1.04918							
N1	S	18	A1G	.00000	-.00193	.00020	.24113	-.00195	.22545	.03333	.00367
			B1G	-.00241	.22707	.00160	.26776	.00570	.00020		
			EU	-.00427	0.00000	0.00000	.00257	0.00000	.46627	0.00000	-.00001
			TOTAL IN EU	.46690			.04112	0.00000	.00631	0.00000	.00192
			TOTAL	.92862							
N1	X	19	A1G	-.00000	.00000	-.00000	.00233	.12873	.05243	.29554	.02090
			B1G	-.00000	.00163	.17844	.01077	.30902	.00013		
			EU	.00000	0.00000	0.00000	-.00007	0.00000	.00392	0.00000	.31530
			TOTAL IN EU	.00454			.43531	0.00000	.22025	0.00000	.00389
			TOTAL	.00850							
N1	X	20	A1G	.00001	.00000	.00031	.01060	.34475	.00032	.11947	.02428
			B1G	.00000	.00256	.31741	.00237	.17713	.00052		
			EU	-.00000	0.00000	0.00000	.00392	0.00000	.01150	0.00000	.00618
			TOTAL IN EU	.02168			.19477	0.00000	.12035	0.00000	.00675
			TOTAL	.03516							
N1	Y	21	A2G	.24285	.25715						
			B2G	.20903	.29096	.00001					
			TOTAL IN B2G	.20903							

Tableau 53 (suite)

			EU	.000000 .04808	-.000000 0.000000	-.000000 .16644	0.000000 0.000000	.000033 .33347	0.000000 0.000000	.44423 .00001	0.000000 0.000000	.00744 0.000000	0.000000
			TOTAL IN EU										
			TOTAL										
N1	Y	22	A2G	.25715	.24205								
			TOTAL IN A2G										
			B2G	.29096	.20899	.000084							
			TOTAL IN B2G		.29096								
			EU	0.000000	.000000	.000006	0.000000	.00132	0.000000	.54323	0.000000	.00169	0.000000
				.01631	0.000000	.13051	0.000000	.30689	0.000000	-.00001	0.000000		
			TOTAL IN EU		.54461								
			TOTAL		1.09273								
N1	Z	23	EG	0.000000	.38975	0.000000	.61024	0.000000	.000001				
			TOTAL IN EG		.38975								
N1	Z	24	EG	0.000000	.61024	0.000000	.38971	0.000000	.000005				
			TOTAL IN EG		.61024								
N1			TOTAL IN A1G	ON N1	.999994								
			TOTAL IN A2G	ON N1	.500000								
			TOTAL IN A2U	ON N1	.000014								
			TOTAL IN B1G	ON N1	.999998								
			TOTAL IN B2G	ON N1	.499999								
			TOTAL IN B2U	ON N1	0.000000								
			TOTAL IN EG	ON N1	.999999								
			TOTAL IN EU	ON N1	3.000441								
			TOTAL ON N1		7.000445								

Tableau 53 (suite)

					.02071	0.00000	.43531	0.00000	.22025	0.00000	.43539	0.00000		
				TOTAL IN EU		.00454								
				TOTAL		.00850								
N2	Y	31	A1G		.00001	.00000	.00031	.01060	.34475	.00032	.11947	.02428	.00011	.00016
				TOTAL IN A1G		.01092								
			B1G		.00000	.00256	.31741	.00237	.17713	.00052				
				TOTAL IN B1G		.00256								
			EU		0.00000	-0.00000	.00392	0.00000	.01158	0.00000	.00618	0.00000	.65641	0.00000
					.00004	0.00000	.19477	0.00000	.12035	0.00000	.00675	0.00000		
				TOTAL IN EU		.02168								
				TOTAL		.03516								
N2	Z	32	EG		.38975	0.00000	.61024	0.00000	.00001	0.00000				
				TOTAL IN EG		.38975								
N2	Z	33	EG		.61024	0.00000	.38971	0.00000	.00005	0.00000				
				TOTAL IN EG		.61024								
N2			TOTAL IN A1G	ON N2		.99994								
			TOTAL IN A2G	ON N2		.50000								
			TOTAL IN A2U	ON N2		.00014								
			TOTAL IN B1G	ON N2		.99998								
			TOTAL IN B2G	ON N2		.49999								
			TOTAL IN B2U	ON N2		0.00000								
			TOTAL IN EG	ON N2		.99999								
			TOTAL IN EU	ON N2		3.00441								
			TOTAL ON N2			7.00445								

Tableau 53 (suite)

MULLIKEN POPULATION ANALYSIS													
MG(2+)N4,D4H, MG(2+)=(321/21/14), N=(321/21), PA59													
				1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
N3	S	34	A1G	.00000	.49438	.00000	.00386	.00024	.00135	.00015	.00002	.00000	.00000
			TOTAL IN A1G		.49824								
			B1G	.49438	.00420	.00003	.00135	.00004	.00000				
			TOTAL IN B1G		.49858								
			EU	.98877	0.00000	0.00000	.00008	0.00000	.00806	0.00000	.00006	0.00000	.00018
				0.00000	.00271	0.00000	.00018	0.00000	.00004	0.00000	.00001		
			TOTAL IN EU		.99689								
			TOTAL		1.99371								
N3	S	35	A1G	-.00000	.00755	-.00000	.24151	.02317	.20226	.02273	.00277	.00000	.00001
			TOTAL IN A1G		.24905								
			B1G	.00003	.26452	.00234	.21760	.00746	.00005				
			TOTAL IN B1G		.27255								
			EU	.01550	0.00000	0.00000	-.00024	0.00000	.50687	0.00000	.00543	0.00000	.01669
				0.00000	.41970	0.00000	.02736	0.00000	.00754	0.00000	.00114		
			TOTAL IN EU		.52757								
			TOTAL		1.04918								
N3	S	36	A1G	.00000	-.00193	.00020	.24113	-.00195	.22545	.03333	.00367	.00003	.00007
			TOTAL IN A1G		.23940								
			B1G	-.00241	.22707	.00160	.26776	.00570	.00020				
			TOTAL IN B1G		.22466								
			EU	-.00427	0.00000	0.00000	.00257	0.00000	.46627	0.00000	-.00002	0.00000	-.00081
				0.00000	.48690	0.00000	.04112	0.00000	.00631	0.00000	.00192		
			TOTAL IN EU		.46456								
			TOTAL		.92862								
N3	X	37	A1G	-.00000	.00000	-.00000	.00233	.12873	.05243	.29554	.02090	.00002	.00005
			TOTAL IN A1G		.00233								
			B1G	-.00000	.00163	.17844	.01077	.30902	.00013				
			TOTAL IN B1G		.00163								
			EU	.00000	0.00000	0.00000	-.00007	0.00000	.00392	0.00000	.00069	0.00000	.31530
				0.00000	.02071	0.00000	.43531	0.00000	.22025	0.00000	.00389		
			TOTAL IN EU		.00454								
			TOTAL		.00850								
N3	X	38	A1G	.00001	.00000	.00031	.01060	.34475	.00032	.11947	.02428	.00011	.00016
			TOTAL IN A1G		.01092								
			B1G	.00000	.00256	.31741	.00237	.17713	.00052				
			TOTAL IN B1G		.00256								
			EU	-.00000	0.00000	0.00000	.00392	0.00000	.01158	0.00000	.00618	0.00000	.65641
				0.00000	.00004	0.00000	.19477	0.00000	.12035	0.00000	.00675		
			TOTAL IN EU		.02168								
			TOTAL		.03516								
N3	Y	39	A2G	.24285	.25715								
			TOTAL IN A2G		.24285								
			B2G	.20903	.29096	.00001							
			TOTAL IN B2G		.20903								

Tableau 53 (suite)

				EU	0.00000	-0.00000	-0.00000	0.00000	.000033	0.000000	.44423	0.000000	.00744	0.00000
					.04888	0.00000	.16644	0.00000	.33347	0.00000	.00001	0.00000		
				TOTAL IN EU		.44456								
				TOTAL		.89644								
N3	Y	40	A2G		.25715	.24285								
				TOTAL IN A2G		.25715								
			B2G		.29096	.20899	.00004							
				TOTAL IN B2G		.29096								
			EU		0.00000	.00000	.00006	0.00000	.00132	0.00000	.54323	0.00000	.00169	0.00000
					.01631	0.00000	.13051	0.00000	.38689	0.00000	-.00001	0.00000		
				TOTAL IN EU		.54461								
				TOTAL		1.09273								
N3	Z	41	EG		0.00000	.38975	0.00000	.61024	0.00000	.00001				
				TOTAL IN EG		.38975								
N3	Z	42	EG		0.00000	.61024	0.00000	.38971	0.00000	.00005				
				TOTAL IN EG		.61024								
N3			TOTAL IN A1G	ON N3		.99994								
			TOTAL IN A2G	ON N3		.50000								
			TOTAL IN A2U	ON N3		.00014								
			TOTAL IN B1G	ON N3		.99998								
			TOTAL IN B2G	ON N3		.49999								
			TOTAL IN B2U	ON N3		0.00000								
			TOTAL IN EG	ON N3		.99999								
			TOTAL IN EU	ON N3		3.00441								
			TOTAL ON N3			7.00445								

Tableau 53 (suite)

MULLIKEN POPULATION ANALYSIS													
MG(2+)N4,D4H, MG(2+)= (321/21/1*), N= (321/21), PA59													
				1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
N4	S	43	A1G	.00000	.49438	.00000	.00386	.00024	.00135	.00015	.00002	.00000	.00000
			TOTAL IN A1G		.49824								
			B1G	.49438	.00420	.00003	.00135	.00004	.00000				
			TOTAL IN B1G		.49858								
			EU	0.00000	.98877	.00000	0.00000	.00006	0.00000	.00006	0.00000	.00018	0.00000
			TOTAL IN EU	.00271	0.00000	.00018	0.00000	.00004	0.00000	.00001	0.00000		
			TOTAL		.99689								
			TOTAL		1.99371								
N4	S	44	A1G	-.00000	.00755	-.00000	.24151	.02317	.20226	.02273	.00277	.00000	.00001
			TOTAL IN A1G		.24905								
			B1G	.00003	.26452	.00234	.21760	.00746	.00005				
			TOTAL IN B1G		.27255								
			EU	0.00000	.01550	-.00024	0.00000	.50687	0.00000	.00543	0.00000	.01669	0.00000
			TOTAL IN EU	.41970	0.00000	.02736	0.00000	.00754	0.00000	.00114	0.00000		
			TOTAL		.52757								
			TOTAL		1.04918								
N4	S	45	A1G	.00000	-.00193	.00020	.24113	-.00195	.22545	.03333	.00367	.00003	.00007
			TOTAL IN A1G		.23940								
			B1G	-.00241	.22707	.00168	.26776	.00570	.00020				
			TOTAL IN B1G		.22466								
			EU	0.00000	-.00427	.00257	0.00000	.46627	0.00000	-.00002	0.00000	-.00081	0.00000
			TOTAL IN EU	.48690	0.00000	.04112	0.00000	.00631	0.00000	.00192	0.00000		
			TOTAL		.46456								
			TOTAL		.92862								
N4	X	46	A2G	.24285	.25715								
			TOTAL IN A2G		.24285								
			B2G	.20903	.29096	.00001							
			TOTAL IN B2G		.20903								
			EU	-.00000	0.00000	0.00000	-.00000	0.00000	.00033	0.00000	.44423	0.00000	.00744
			TOTAL IN EU	0.00000	.04808	0.00000	.16644	0.00000	.33347	0.00000	.00001		
			TOTAL		.44456								
			TOTAL		.89644								
N4	X	47	A2G	.25715	.24285								
			TOTAL IN A2G		.25715								
			B2G	.29096	.20899	.00004							
			TOTAL IN B2G		.29096								
			EU	-.00000	0.00000	0.00000	.00006	0.00000	.00132	0.00000	.54323	0.00000	.00169
			TOTAL IN EU	0.00000	.01631	0.00000	.13051	0.00000	.30689	0.00000	-.00001		
			TOTAL		.54461								
			TOTAL		1.09273								
N4	Y	48	A1G	-.00000	.00000	-.00000	.00233	.12873	.05243	.29554	.02090	.00002	.00005
			TOTAL IN A1G		.00233								
			B1G	-.00000	.00163	.17844	.01077	.30902	.00013				
			TOTAL IN B1G		.00163								
			EU	0.00000	.00000	-.00007	0.00000	.00392	0.00000	.00069	0.00000	.31530	0.00000

Tableau 53 (suite)

					.02071	0.00000	.43531	0.00000	.22025	0.00000	.00389	0.00000	
				TOTAL IN EU			.00454						
				TOTAL			.00850						
N4	Y	49	A1G		.00001	.00000	.00031	.01060	.34475	.00032	.11947	.02428	.00011 .00016
				TOTAL IN A1G			.01092						
			B1G		.00000	.00256	.31741	.00237	.17713	.00052			
				TOTAL IN B1G			.00256						
			EU		0.00000	-0.00000	.00392	0.00000	.01158	0.00000	.00618	0.00000	.65641 0.00000
					.00004	0.00000	.19477	0.00000	.12035	0.00000	.00675	0.00000	
				TOTAL IN EU			.02160						
				TOTAL			.03516						
N4	Z	50	EG		.38975	0.00000	.61024	0.00000	.00001	0.00000			
				TOTAL IN EG			.38975						
N4	Z	51	EG		.61024	0.00000	.38971	0.00000	.00005	0.00000			
				TOTAL IN EG			.61024						
N4			TOTAL IN A1G	ON N4			.99994						
			TOTAL IN A2G	ON N4			.50000						
			TOTAL IN A2U	ON N4			.00014						
			TOTAL IN B1G	ON N4			.99998						
			TOTAL IN B2G	ON N4			.49999						
			TOTAL IN B2U	ON N4			0.00000						
			TOTAL IN EG	ON N4			.99999						
			TOTAL IN EU	ON N4			3.00441						
			TOTAL ON N4				7.00445						
CONSIDER OVERLAPS IN BONDS LESS THAN 7.79700000 AU LONG													

Tableau 54
Analyse de population de recouvrement pour $Mg^{2+}N_4$.

MG(2+)N ₄ , D _{4h} , MG(2+)=(321/21/1*), N=(321/21), PA59 OVERLAP POPULATIONS										
PAGE 1										
1. FROM A1G	MOLECULAR	ORBITALS								
	N1	N2	N2	N3	N3	N3	N4	N4	N4	N4
	MG(2+)	MG(2+)	N1	MG(2+)	N1	N2	MG(2+)	N1	N2	N3
3A1G	.00096	.00096	.00000	.00096	.00000	.00000	.00096	.00000	.00000	.00000
4A1G	-.00301	-.00301	.02023	-.00301	.00073	.02023	-.00301	.02023	.00073	.02023
TOTAL FROM A1G	-.00203	-.00203	.02022	-.00203	.00073	.02022	-.00203	.02022	.00073	.02022
2. FROM A2G	MOLECULAR	ORBITALS								
	N1	N2	N2	N3	N3	N3	N4	N4	N4	N4
	MG(2+)	MG(2+)	N1	MG(2+)	N1	N2	MG(2+)	N1	N2	N3
1A2G	0.00000	0.00000	-.02210	0.00000	-.00005	-.02210	0.00000	-.02210	-.00005	-.02210
TOTAL FROM A2G	0.00000	0.00000	-.02210	0.00000	-.00005	-.02210	0.00000	-.02210	-.00005	-.02210
3. FROM A2U	MOLECULAR	ORBITALS								
	N1	N2	N2	N3	N3	N3	N4	N4	N4	N4
	MG(2+)	MG(2+)	N1	MG(2+)	N1	N2	MG(2+)	N1	N2	N3
1A2U	.00019	.00019	.00000	.00019	.00000	.00000	.00019	.00000	.00000	.00000
TOTAL FROM A2U	.00019	.00019	.00000	.00019	.00000	.00000	.00019	.00000	.00000	.00000
4. FROM B1G	MOLECULAR	ORBITALS								
	N1	N2	N2	N3	N3	N3	N4	N4	N4	N4
	MG(2+)	MG(2+)	N1	MG(2+)	N1	N2	MG(2+)	N1	N2	N3
2B1G	.00002	.00002	-.02001	.00002	.00070	-.02001	.00002	-.02001	.00070	-.02001
TOTAL FROM B1G	.00002	.00002	-.02000	.00002	.00071	-.02000	.00002	-.02000	.00071	-.02000
5. FROM B2G	MOLECULAR	ORBITALS								
	N1	N2	N2	N3	N3	N3	N4	N4	N4	N4
	MG(2+)	MG(2+)	N1	MG(2+)	N1	N2	MG(2+)	N1	N2	N3
1B2G	.00001	.00001	.02189	.00001	-.00005	.02189	.00001	.02189	-.00005	.02189
TOTAL FROM B2G	.00001	.00001	.02189	.00001	-.00005	.02189	.00001	.02189	-.00005	.02189
6. FROM B2U	MOLECULAR	ORBITALS								
	N1	N2	N2	N3	N3	N3	N4	N4	N4	N4
	MG(2+)	MG(2+)	N1	MG(2+)	N1	N2	MG(2+)	N1	N2	N3
TOTAL FROM B2U	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
7. FROM EG	MOLECULAR	ORBITALS								
	N1	N2	N2	N3	N3	N3	N4	N4	N4	N4
	MG(2+)	MG(2+)	N1	MG(2+)	N1	N2	MG(2+)	N1	N2	N3
1EG	0.00000	.00001	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	.00001	0.00000	-.00013	0.00000
2EG	.00001	0.00000	0.00000	.00001	-.00013	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
TOTAL FROM EG	.00001	.00001	0.00000	.00001	-.00013	0.00000	.00001	0.00000	-.00013	0.00000
8. FROM EU	MOLECULAR	ORBITALS								
	N1	N2	N2	N3	N3	N3	N4	N4	N4	N4
	MG(2+)	MG(2+)	N1	MG(2+)	N1	N2	MG(2+)	N1	N2	N3
3EU	.00008	.00914	.00002	.00008	.00000	.00002	.00914	.00002	-.00002	.00002
4EU	.00914	.00008	.00002	.00914	-.00002	.00002	.00008	.00002	.00000	.00002
5EU	-.00003	-.00403	.00099	-.00003	.00000	.00099	-.00403	.00099	-.00141	.00099
6EU	-.00403	-.00003	.00099	-.00403	-.00141	.00099	-.00003	.00099	.00000	.00099

Tableau 54 (suite)

7EU	-.00030	-.00017	.00261	-.00030	.00011	.00261	-.00017	.00261	-.00002	.00261
8EU	-.00017	-.00030	.00261	-.00017	-.00002	.00261	-.00030	.00261	.00011	.00261
TOTAL FROM EU	.00470	.00470	.00724	.00470	-.00134	.00724	.00470	.00724	-.00134	.00724
TOTAL FROM ALL MOLECULAR ORBITALS										
	N1	N2	N2	N3	N3	N3	N4	N4	N4	N4
	MG(2+)	MG(2+)	N1	MG(2+)	N1	N2	MG(2+)	N1	N2	N3
OVERLAP CHARGE	.00292	.00292	.00725	.00292	-.00014	.00725	.00292	.00725	-.00014	.00725
DISTANCE (AU)	3.89800	3.89800	5.51260	3.89800	7.79600	5.51260	3.89800	5.51260	7.79600	5.51260

Tableau 55
Données pour PA41 du fragment Mg^{2+}N_4 dans une base de VD.

MG(2+)=M4,D4H,MG(2+)= (321/21/1+),N=(321/21),PA41																	
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 1 0 0 0 0 0 0																	
MGMINT																	
26 26																	
5 A1G 4																	
1 1.0																	
7 1.0																	
5 0.5 6 0.5																	
11 0.25 15 0.25 19 0.25 23 0.25																	
12 0.25 17 0.25 20 -0.25 25 -0.25																	
1 A2G 4																	
13 0.25 16 -0.25 21 -0.25 24 0.25																	
2 A2U 4																	
4 1.0																	
14 0.25 18 0.25 22 0.25 26 0.25																	
3 B1G 4																	
5 0.5 6 -0.5																	
11 0.25 15 -0.25 19 0.25 23 -0.25																	
12 0.25 17 -0.25 20 -0.25 25 0.25																	
2 B2G 4																	
8 1.0																	
13 0.25 16 0.25 21 -0.25 24 -0.25																	
1 B2U 4																	
14 0.25 18 -0.25 22 0.25 26 -0.25																	
4 EG 4																	
9 1.0																	
10 1.0																	
14 0.5 22 -0.5																	
18 0.5 26 -0.5																	
8 EU 4																	
2 1.0																	
3 1.0																	
11 0.5 19 -0.5																	
15 0.5 23 -0.5																	
12 0.5 20 0.5																	
16 0.5 24 0.5																	
13 0.5 21 0.5																	
17 0.5 25 0.5																	
3 2 2 2 1 1 1 1 1 3 2 2 2 3 2 2 2 3 2 2 3 2																	
2 2																	
7																	
1.0 0.0 1.0 0.0 1.0 0.0																	
1.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0																	
0.0 0.0																	
1																	
1.0 0.0																	
2																	
1.0 0.0 1.0 0.0																	
4																	
1.0 0.0 1.0 0.0 0.0 0.0																	
0.0 0.0																	
2																	
1.0 0.0 0.0 0.0																	
1																	
0.0 0.0																	
4																	
0.0 0.5 0.0 0.5 0.0 0.0																	
0.0 0.0																	
10																	
1.0 0.0 1.0 0.0 1.0 0.0																	
1.0 0.0 1.0 0.0 1.0 0.0																	
1.0 0.0 1.0 0.0 0.0 0.0																	
0.0 0.0																	
0.0 -2.0 0.5																	

Tableau 56
Energies relatives à l'itération 32 pour $Mg^{2+}N_4$.

MG(2+)N4,D4H,MG(2+)= (321/21/1*),N= (321/21),PA41 PA41 SINGLE HAMILTONIAN OPEN SHELL HARTREE-FOCK LCAO-MO-SCF PACKAGE RESULTS OF ITERATION 32							
	PRESENT ITERATION		PREVIOUS ITERATION		CHANGE		
KINETIC ENERGY, T =	400.2520531344		400.2520530402		.0000000861		
ONE ELECTRON POTENTIAL ENERGY, V(1) =	-1226.9508794269		-1226.9508791777		-.0000002492		
ONE ELECTRON ENERGY, H = T+V(1) =	-816.6980262925		-816.6980261294		-.0000001631		
TWO ELECTRON POTENTIAL ENERGY, V(1,2) =	271.3387459272		271.3387457642		.0000001630		
ELECTRONIC POTENTIAL ENERGY, V(E) = V(1)+V(1,2) =	-955.6121334997		-955.6121334134		-.0000000862		
ELECTRONIC ENERGY, E(E) = H+V(1,2) =	-547.3592803653		-547.3592803652		-.0000000001		
NUCLEAR REPULSION ENERGY, V(N) =	134.3234010440		134.3234010440				
POTENTIAL ENERGY, V = V(E)+V(N) =	-821.2886524549		-821.2886523687		-.0000000862		
VIRIAL, -V/T =	2.0117156467		2.0117156469				
TOTAL ENERGY, E = E(E)+V(N) =	-413.0357993205		-413.0357993204		-.0000000001		
ORBITAL ENERGIES (VALUES OF PREVIOUS ITERATION IN PARENTHESES)							
1. A1G ORBITALS, COMBINED (10) (1 - 10)							
-49.45821904 (-49.45821904)	-16.04777453 (-16.04777455)	-4.44160622 (-4.44160622)	-1.40742513 (-1.40742514)				
-.50509543 (-.50509545)	.27389176 (.27389175)	.83641848 (.83641847)	2.01791014 (2.01791014)				
6.17063024 (6.17063024)	15.66637179 (15.66637179)						
2. A2G ORBITALS, COMBINED (2) (11 - 12)							
-.85932633 (-.85932631)	1.09444517 (1.09444517)						
3. A2U ORBITALS, COMBINED (4) (13 - 16)							
-2.93885811 (-2.93885811)	-.47413180 (-.47413181)	.83433291 (.83433289)	3.74971241 (3.74971241)				
4. B1G ORBITALS, COMBINED (6) (17 - 22)							
-16.04823985 (-16.04823987)	-1.36044169 (-1.36044170)	-.42136443 (-.42136444)	.59709196 (.59709195)				
1.07949198 (1.07949197)	6.18701142 (6.18701142)						
5. B2G ORBITALS, COMBINED (3) (23 - 25)							
-.92583142 (-.92583141)	.81043894 (.81043893)	6.16546736 (6.16546736)					
6. B2U ORBITALS, COMBINED (2) (26 - 27)							
-.83549911 (-.83549912)	.92158750 (.92158749)						
7. EG ORBITALS, COMBINED (6) (28 - 33)							
-.64883359 (-.64883360)	-.64883359 (-.64883360)	.87845436 (.87845434)	.87845436 (.87845434)				
6.16612535 (6.16612535)	6.16612535 (6.16612535)						
8. EU ORBITALS, COMBINED (18) (34 - 51)							
-16.04796250 (-16.04796252)	-16.04796250 (-16.04796252)	-2.94227854 (-2.94227854)	-2.94227854 (-2.94227854)				
-1.38043623 (-1.38043624)	-1.38043623 (-1.38043624)	-.89415421 (-.89415421)	-.89415421 (-.89415421)				
-.45245150 (-.45245151)	-.45245150 (-.45245151)	.41609716 (.41609716)	.41609716 (.41609716)				
.88678157 (.88678157)	.88678157 (.88678157)	1.05275409 (1.05275408)	1.05275409 (1.05275408)				
3.90255634 (3.90255634)	3.90255634 (3.90255634)						
COMPUTED ENERGY		ELAPSED TIME = .185 SECONDS					
FINISHED SCF		ELAPSED TIME = 5.985 SECONDS					

Tableau 57
OM de l'itération 32 pour $Mg^{2+}N_4$.

MG(2+)N4,D4H,MG(2+)=(321/21/1*),N=(321/21),PA41										
COMBINED ORBITALS										
ITERATION 32										
ROW	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
1A1G	-49.4582190	1.000000								
1	.9829088	.0891296	-.0150624	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.0144565
	-.0144565	-.0144242	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.0000011	-.0004233	.0005726	.0002694	-.0005872
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.0000011	-.0004233	.0005726	0.0000000	0.0000000	.0002694
	-.0005872	0.0000000	0.0000000	-.0000011	-.0004233	.0005726	-.0002694	.0005872	0.0000000	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	-.0000011	-.0004233	.0005726	0.0000000	0.0000000	-.0002694	.0005872	0.0000000
	0.0000000									
2A1G	-16.0477745	1.000000								
2	-.0002399	-.0008102	.0037042	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.0005775
	-.0005775	-.0006634	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.4949447	.0293201	-.0108274	.0003742	-.0004377
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.4949447	.0293201	-.0108274	0.0000000	0.0000000	.0003742
	-.0004377	0.0000000	0.0000000	.4949447	.0293201	-.0108274	-.0003742	.0004377	0.0000000	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	.4949447	.0293201	-.0108274	0.0000000	0.0000000	-.0003742	.0004377	0.0000000
	0.0000000									
3A1G	-4.4416062	1.000000								
3	.2685144	-.5824626	-.4828261	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.0023468
	-.0023468	-.0021414	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.0003056	.0004644	-.0022708	-.0001533	.0021339
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.0003056	.0004644	-.0022708	0.0000000	0.0000000	-.0001533
	.0021339	0.0000000	0.0000000	.0003056	.0004644	-.0022708	-.0001533	-.0021339	0.0000000	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	.0003056	.0004644	-.0022708	0.0000000	0.0000000	.0001533	-.0021339	0.0000000
	0.0000000									
4A1G	-1.4074251	1.000000								
4	-.0124767	.0464441	.0159913	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.0018656
	.0018656	.0043214	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.1141272	-.2670364	-.2536420	.0222490	.0561449
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.1141272	-.2670364	-.2536420	0.0000000	0.0000000	.0222490
	.0561449	0.0000000	0.0000000	.1141272	-.2670364	-.2536420	-.0222490	-.0561449	0.0000000	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	.1141272	-.2670364	-.2536420	0.0000000	0.0000000	-.0222490	-.0561449	0.0000000
	0.0000000									
5A1G	-.5050954									
5	.0222567	-.1202631	.0316321	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.0009135
	-.0009135	-.0152295	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.0271702	-.1252809	.0260203	-.1810221	-.3552427
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.0271702	-.1252809	.0260203	0.0000000	0.0000000	-.1810221
	-.3552427	0.0000000	0.0000000	.0271702	-.1252809	.0260203	.1810221	.3552427	0.0000000	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	.0271702	-.1252809	.0260203	0.0000000	0.0000000	.1810221	.3552427	0.0000000
	0.0000000									
6A1G	.2738918									
6	.0266283	-.2292761	.1700419	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.0247427
	-.0247427	-.0318967	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.0577579	-.7084615	.6748866	.1698438	-.0297297
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.0577579	-.7084615	.6748866	0.0000000	0.0000000	.1698438
	-.0297297	0.0000000	0.0000000	.0577579	-.7084615	.6748866	-.1698438	.0297297	0.0000000	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	.0577579	-.7084615	.6748866	0.0000000	0.0000000	-.1698438	.0297297	0.0000000
	0.0000000									
7A1G	.8364185									
7	.0225879	-.3059816	.3381859	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.0377248
	-.0377248	-.0459477	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.0175097	.2774794	-.2941651	.4882986	-.3719589
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.0175097	.2774794	-.2941651	0.0000000	0.0000000	.4882986
	-.3719589	0.0000000	0.0000000	-.0175097	.2774794	-.2941651	.4882986	.3719589	0.0000000	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	-.0175097	.2774794	-.2941651	0.0000000	0.0000000	-.4882986	.3719589	0.0000000

Tableau 58
Analyse de population de Mulliken pour Mg^{2+}N_4 .

MULLIKEN POPULATION ANALYSIS											
MG(2+)N4, D4H, MG(2+)=(321/21/1*), N=(321/21), PA59											
			1	2	3	4	5	6	7	8	9
MG(2+) S	1	A1G	1.96364	-.00000	.02085	.00005	.00016	.00029	.00028	.00234	.00000
		TOTAL IN A1G		1.98453							.01239
MG(2+) S	2	A1G	.05067	-.00000	1.07611	.00281	.01333	.03356	.04530	.63300	.00006
		TOTAL IN A1G		1.12959							.14515
MG(2+) S	3	A1G	-.00636	-.00000	.89142	-.00092	.00390	.02992	.06160	1.08698	.00008
		TOTAL IN A1G		.88413							-.06661
MG(2+) X	4	EU	0.00000	-.00000	0.00000	.92690	.00321	0.00000	0.00000	.00044	0.00000
		TOTAL IN EU	.01286	0.00000	0.00000	.00043	.00981	0.00000	1.03031	0.00000	.00804
MG(2+) X	5	EU	0.00000	-.00000	0.00000	1.06076	-.00007	0.00000	0.00000	-.00007	0.00000
		TOTAL IN EU	-.00199	0.00000	0.00000	.00031	.00036	0.00000	.94261	0.00000	-.00191
MG(2+) Y	6	EU	-.00000	0.00000	.92690	0.00000	0.00000	.00321	.00044	0.00000	.00804
		TOTAL IN EU	0.00000	.01286	.00043	0.00000	0.00000	.00981	0.00000	1.03031	0.00000
MG(2+) Y	7	EU	-.00000	0.00000	1.06076	0.00000	0.00000	-.00007	-.00007	0.00000	-.00191
		TOTAL IN EU	0.00000	-.00199	.00031	0.00000	0.00000	.00036	0.00000	.94261	0.00000
MG(2+) Z	8	A2U	.93403	.00054	.00186	1.06356					
		TOTAL IN A2U		.93457							
MG(2+) Z	9	A2U	1.06549	-.00008	.00020	.93439					
		TOTAL IN A2U		1.06541							
MG(2+) TOTAL IN A1G	ON MG(2+)	4.00023									
TOTAL IN A2G	ON MG(2+)	0.00000									
TOTAL IN A2U	ON MG(2+)	1.99999									
TOTAL IN B1G	ON MG(2+)	.00006									
TOTAL IN B2G	ON MG(2+)	.00003									
TOTAL IN B2U	ON MG(2+)	0.00000									
TOTAL IN EG	ON MG(2+)	.00002									
TOTAL IN EU	ON MG(2+)	3.98234									
TOTAL ON MG(2+)		9.98268									

Tableau 58 (suite)

MULLIKEN POPULATION ANALYSIS													
MG(2+)N4,D4H, MG(2+)={321/21/1*}, N={321/21}, PA59													
				1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
N1	S	16	A1G	.00000	.49450	.00000	.00373	.00024	.00137	.00014	.00002	.00000	.00000
			TOTAL IN A1G		.49823								
			B1G	.49451	.00406	.00003	.00136	.00003	.00000				
			TOTAL IN B1G		.49858								
			EU	0.00000	.98902	0.00000	.00000	.00779	0.00000	0.00000	.00007	0.00000	.00018
				.00272	0.00000	0.00000	.00017	.00004	0.00000	.00001	0.00000		
			TOTAL IN EU		.99688								
			TOTAL		1.99369								
N1	S	17	A1G	-.00000	.00746	-.00000	.24039	.02355	.20414	.02174	.40270	.00000	.00001
			TOTAL IN A1G		.24785								
			B1G	.00794	.26466	.00239	.21779	.00718	.00005				
			TOTAL IN B1G		.27260								
			EU	0.00000	.01532	0.00000	-.00024	.50562	0.00000	0.00000	.00657	0.00000	.01688
				.42147	0.00000	0.00000	.02597	.00730	0.00000	.00119	0.00000		
			TOTAL IN EU		.52727								
			TOTAL		1.04772								
N1	S	18	A1G	.00000	-.00197	.00020	.24235	-.00205	.22549	.03235	.00353	.00003	.00007
			TOTAL IN A1G		.24059								
			B1G	-.00245	.22714	.00151	.26828	.00532	.00020				
			TOTAL IN B1G		.22469								
			EU	0.00000	-.00434	0.00000	.00251	.46689	0.00000	0.00000	-.00001	0.00000	-.00106
				.48840	0.00000	0.00000	.03971	.00602	0.00000	.00188	0.00000		
			TOTAL IN EU		.46504								
			TOTAL		.93032								
N1	X	19	A1G	-.00000	.00000	-.00000	.00231	.13019	.05126	.29551	.02066	.00002	.00005
			TOTAL IN A1G		.00231								
			B1G	-.00000	.00161	.17973	.01018	.30835	.00013				
			TOTAL IN B1G		.00161								
			EU	0.00000	.00000	0.00000	-.00007	.00390	0.00000	0.00000	.00067	0.00000	.31809
				.02012	0.00000	0.00000	.43414	.21927	0.00000	.00387	0.00000		
			TOTAL IN EU		.00451								
			TOTAL		.00842								
N1	X	20	A1G	.00001	.00000	.00031	.01065	.34317	.00022	.12136	.02401	.00011	.00016
			TOTAL IN A1G		.01097								
			B1G	.00000	.00251	.31624	.00226	.17847	.00052				
			TOTAL IN B1G		.00251								
			EU	0.00000	.00000	0.00000	.00390	.01167	0.00000	0.00000	.00612	0.00000	.65361
				-.00013	0.00000	0.00000	.19684	.12130	0.00000	.00668	0.00000		
			TOTAL IN EU		.02169								
			TOTAL		.03517								
N1	Y	21	A2G	.24236	.25764								
			TOTAL IN A2G		.24236								
			B2G	.20840	.29159	.00001							
			TOTAL IN B2G		.20840								

Tableau 58 (suite)

			EU	- .00000	0.00000	- .00000	0.00000	0.00000	.00059	.44276	0.00000	.00750	0.00000
				0.00000	.04663	.16810	0.00000	0.00000	.33442	0.00000	.00001		
			TOTAL IN EU		.44334								
			TOTAL		.89410								
N1	Y	22	A2G	.25764	.24236								
			TOTAL IN A2G		.25764								
			B2G	.29159	.20836	.00004							
			TOTAL IN B2G		.29159								
			EU	.00000	0.00000	.00006	0.00000	0.00000	.00198	.54363	0.00000	.00174	0.00000
				0.00000	.01534	.13069	0.00000	0.00000	.30657	0.00000	-.00001		
			TOTAL IN EU		.54568								
			TOTAL		1.09491								
N1	Z	23	A2U	-.00000	.18957	.31029	.00015						
			TOTAL IN A2U		.18957								
			EG	.42223	0.00000	.57776	0.00000	.00001	0.00000				
			TOTAL IN EG		.21111								
			TOTAL		.40068								
N1	Z	24	A2U	.00012	.31032	.18920	.00037						
			TOTAL IN A2U		.31044								
			EG	.57776	0.00000	.42219	0.00000	.00005	0.00000				
			TOTAL IN EG		.28888								
			TOTAL		.59932								
N1			TOTAL IN A1G	ON N1	.99994								
			TOTAL IN A2G	ON N1	.50000								
			TOTAL IN A2U	ON N1	.50000								
			TOTAL IN B1G	ON N1	.99998								
			TOTAL IN B2G	ON N1	.49999								
			TOTAL IN B2U	ON N1	0.00000								
			TOTAL IN EG	ON N1	.50000								
			TOTAL IN EU	ON N1	3.00441								
			TOTAL ON N1		7.00433								

Tableau 58 (suite)

MULLIKEN POPULATION ANALYSIS													
MG(2*)N4,D4H,MG(2*)=(321/21/1*),N=(321/21),PA59													
				1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
N2	S	25	A1G	.00000	.49450	.00000	.00373	.00024	.00137	.00014	.00002	.00000	.00000
			TOTAL IN A1G		.49823								
			B1G	.49451	.00406	.00083	.00136	.00003	.00000				
			TOTAL IN B1G		.49858								
			EU	.98902	0.00000	.00000	0.00000	0.00000	.00779	.00007	0.00000	.00018	0.00000
				0.00000	.00272	.00017	0.00000	0.00000	.00004	0.00000	.00001		
			TOTAL IN EU		.99688								
			TOTAL		1.99369								
N2	S	26	A1G	-.00000	.00746	-.00000	.24039	.02355	.20414	.02174	.40270	.00000	.00001
			TOTAL IN A1G		.24785								
			B1G	.00794	.26466	.00239	.21779	.00718	.00005				
			TOTAL IN B1G		.27260								
			EU	.01532	0.00000	-.00024	0.00000	0.00000	.50562	.00657	0.00000	.01688	0.00000
				0.00000	.42147	.02597	0.00000	0.00000	.00730	0.00000	.40110		
			TOTAL IN EU		.52727								
			TOTAL		1.04772								
N2	S	27	A1G	.00000	-.00197	.06020	.24235	-.00205	.22549	.03235	.00353	.00003	.00007
			TOTAL IN A1G		.24059								
			B1G	-.00245	.22714	.00151	.26828	.00532	.00020				
			TOTAL IN B1G		.22469								
			EU	-.00934	0.00000	.00251	0.00000	0.00000	.46689	-.00001	0.00000	-.00106	0.00000
				0.00000	.48840	.03971	0.00000	0.00000	.00602	0.00000	.00188		
			TOTAL IN EU		.46504								
			TOTAL		.93032								
N2	X	28	A2G	.24236	.25764								
			TOTAL IN A2G		.24236								
			B2G	.20840	.29159	.00001							
			TOTAL IN B2G		.20840								
			EU	0.00000	-.00000	0.00000	-.00000	.00059	0.00000	0.00000	.44276	0.00000	.00750
				.04663	0.00000	0.00000	.16810	.33442	0.00000	.00001	0.00000		
			TOTAL IN EU		.44334								
			TOTAL		.89410								
N2	X	29	A2G	.25764	.24236								
			TOTAL IN A2G		.25764								
			B2G	.29159	.20836	.00004							
			TOTAL IN B2G		.29159								
			EU	0.00000	.00000	0.00000	.00006	.00198	0.00000	0.00000	.54363	0.00000	.00174
				.01534	0.00000	0.00000	.13069	.30657	0.00000	-.00001	0.00000		
			TOTAL IN EU		.54568								
			TOTAL		1.09491								
N2	Y	30	A1G	-.00000	.00000	-.00000	.00231	.13019	.05126	.29551	.02066	.00002	.00005
			TOTAL IN A1G		.00231								
			B1G	-.00000	.00161	.17973	.01018	.30835	.00013				
			TOTAL IN B1G		.00161								
			EU	.00000	0.00000	-.00007	0.00000	0.00000	.00390	.00067	0.00000	.31809	0.00000

Tableau 58 (suite)

				0.00000	.02012	.43414	0.00000	0.00000	.21927	0.00000	.00387			
				TOTAL IN EU	.00451									
				TOTAL	.00842									
N2	Y	31	A1G	.00001	.00000	.00031	.01065	.34317	.00022	.12136	.02401	.00011	.00016	
				TOTAL IN A1G	.01097									
				B1G	.00000	.00251	.31624	.00226	.17847	.00052				
				TOTAL IN B1G	.00251									
				EU	.00000	0.00000	.00390	0.00000	0.00000	.01167	.00612	0.00000	.65361	0.00000
					0.00000	-.00013	.19684	0.00000	0.00000	.12130	0.00000	.00668		
				TOTAL IN EU	.02169									
				TOTAL	.03517									
N2	Z	32	A2U	-.00000	.18957	.31029	.00015							
				TOTAL IN A2U	.18957									
				EG	0.00000	.42223	0.00000	.57776	0.00000	.00001				
				TOTAL IN EG	.21111									
				TOTAL	.40068									
N2	Z	33	A2U	.00012	.31032	.18920	.00037							
				TOTAL IN A2U	.31044									
				EG	0.00000	.57776	0.00000	.42219	0.00000	.00005				
				TOTAL IN EG	.28888									
				TOTAL	.59932									
N2	TOTAL IN A1G			ON N2	.99994									
	TOTAL IN A2G			ON N2	.50000									
	TOTAL IN A2U			ON N2	.50000									
	TOTAL IN B1G			ON N2	.99994									
	TOTAL IN B2G			ON N2	.49999									
	TOTAL IN B2U			ON N2	0.00000									
	TOTAL IN EG			ON N2	.50000									
	TOTAL IN EU			ON N2	3.00441									
	TOTAL			ON N2	7.00433									

Tableau 58 (suite)

MULLIKEN POPULATION ANALYSIS										
MG(12+JN4,04H,MG(12+J)=(321/2)/1+1,N=(321/21),PA59										
		1	2	3	4	5	6	7	8	9 10
N3	S	34	A1G	.00000	.49450	.00000	.00373	.00024	.00137	.00014 .00002 .00000 .00000
			TOTAL IN A1G	.49823						
	B1G		.49451	.00406	.00003	.00136	.00003	.00000		
	TOTAL IN B1G		.49858							
	EU		0.00000	.98902	0.00000	.00000	.00779	0.00000	.00007	.00000 .00018
			.00272	0.00000	0.00000	.00017	.00004	0.00000	.00031	0.00000
	TOTAL IN EU		.99688							
	TOTAL		1.99369							
N3	S	35	A1G	.00000	.00746	.00000	.24039	.02355	.20414	.02174 .00270 .00000 .00001
			TOTAL IN A1G	.24785						
	B1G		.00794	.26466	.00239	.21779	.00718	.00005		
	TOTAL IN B1G		.27260							
	EU		0.00000	.01532	0.00000	.00024	.50562	0.00000	.00000	.00657 .00000 .01688
			.42147	0.00000	0.00000	.02597	.00730	0.00000	.00110	0.00000
	TOTAL IN EU		.52727							
	TOTAL		1.04772							
N3	S	36	A1G	.00000	.00197	.00020	.24235	.00205	.22549	.03235 .00353 .00003 .00007
			TOTAL IN A1G	.24059						
	B1G		.00245	.22714	.00151	.26828	.00532	.00020		
	TOTAL IN B1G		.22469							
	EU		0.00000	.00434	0.00000	.00251	.46689	0.00000	0.00000	.00001 0.00000 -.00106
			.48840	0.00000	0.00000	.03971	.00602	0.00000	.00188	0.00000
	TOTAL IN EU		.46504							
	TOTAL		.93032							
N3	X	37	A1G	.00000	.00000	.00000	.00231	.13019	.05126	.29551 .02066 .00002 .00005
			TOTAL IN A1G	.00231						
	B1G		.00000	.00161	.17973	.01018	.30835	.00013		
	TOTAL IN B1G		.00161							
	EU		0.00000	.00000	0.00000	.00007	.00390	0.00000	0.00000	.00067 0.00000 .31809
			.02012	0.00000	0.00000	.43414	.21927	0.00000	.00387	0.00000
	TOTAL IN EU		.00451							
	TOTAL		.08842							
N3	X	38	A1G	.00001	.00000	.00031	.01065	.34317	.00022	.12136 .62401 .00011 .00016
			TOTAL IN A1G	.01097						
	B1G		.00000	.00251	.31624	.00226	.17847	.00052		
	TOTAL IN B1G		.00251							
	EU		0.00000	.00000	0.00000	.00390	.01167	0.00000	0.00000	.00612 0.00000 .65361
			.00013	0.00000	0.00000	.19884	.12130	0.00000	.00559	0.00000
	TOTAL IN EU		.02169							
	TOTAL		.03517							
N3	Y	39	A2G	.24236	.25764					
	TOTAL IN A2G		.24236							
	B2G		.20840	.29159	.00001					
	TOTAL IN B2G		.20840							

Tableau 58 (suite)

			EU	-0.00000	0.00000	-0.00000	0.00000	0.00000	0.00059	.44276	0.00000	.00750	0.00000
				0.00000	.04663	.16810	0.00000	0.00000	.33442	0.00000	.00001		
			TOTAL IN EU		.44334								
			TOTAL		.89410								
N3	Y	40	A2G	.25764	.24236								
			TOTAL IN A2G		.25764								
			B2G	.29159	.20836	.00004							
			TOTAL IN B2G		.29159								
			EU	.00000	0.00000	.00006	0.00000	0.00000	.00198	.54363	0.00000	.00174	0.00000
				0.00000	.01534	.13069	0.00000	0.00000	.30657	0.00000	-.00001		
			TOTAL IN EU		.54568								
			TOTAL		1.09491								
N3	Z	41	A2U	.00000	.18957	.31029	.00015						
			TOTAL IN A2U		.18957								
			EG	.42223	0.00000	.57776	0.00000	.00001	0.00000				
			TOTAL IN EG		.21111								
			TOTAL		.40068								
N3	Z	42	A2U	.00012	.31032	.18920	.00037						
			TOTAL IN A2U		.31044								
			EG	.57776	0.00000	.42219	0.00000	.00005	0.00000				
			TOTAL IN EG		.28888								
			TOTAL		.59932								
N3			TOTAL IN A1G	ON N3	.99994								
			TOTAL IN A2G	ON N3	.50000								
			TOTAL IN A2U	ON N3	.50000								
			TOTAL IN B1G	ON N3	.99998								
			TOTAL IN B2G	ON N3	.49999								
			TOTAL IN B2U	ON N3	0.00000								
			TOTAL IN EG	ON N3	.50000								
			TOTAL IN EU	ON N3	3.00441								
			TOTAL ON N3		7.00433								

Tableau 58 (suite)

MULLIKEN POPULATION ANALYSIS											
MG(2+)N4,D4H,MG(2+)= (321/21/1*),N= (321/21),PA59											
				1	2	3	4	5	6	7	8
N4	S	43	A1G	.00000	.49450	.00000	.00373	.00024	.00137	.00014	.00002
											.00000
			TOTAL IN A1G		.49823						
			B1G	.49451	.00406	.00003	.00136	.00003	.00000		
			TOTAL IN B1G		.49858						
			EU	.98902	0.00000	.00000	0.00000	0.00000	.00779	.00007	0.00000
				0.00000	.00272	.00017	0.00000	0.00000	.00004	0.00000	.00001
			TOTAL IN EU		.99688						
			TOTAL		1.99369						
N4	S	44	A1G	-.00000	.00746	-.00000	.24039	.02355	.20414	.02174	.00270
											.00000
			TOTAL IN A1G		.24785						
			B1G	.00794	.26466	.00239	.21779	.00718	.00005		
			TOTAL IN B1G		.27260						
			EU	.01532	0.00000	-.00024	0.00000	0.00000	.50562	.00657	0.00000
				0.00000	.42147	.02597	0.00000	0.00000	.00730	0.00000	.00110
			TOTAL IN EU		.52727						
			TOTAL		1.04772						
N4	S	45	A1G	.00000	-.00197	.00020	.24235	-.00205	.22549	.03235	.60353
											.00003
			TOTAL IN A1G		.24059						
			B1G	-.00245	.22714	.00151	.26828	.00532	.00020		
			TOTAL IN B1G		.22469						
			EU	-.00434	0.00000	.00251	0.00000	0.00000	.46689	-.00001	0.00000
				0.00000	.48840	.03971	0.00000	0.00000	.00602	0.00000	.00188
			TOTAL IN EU		.46504						
			TOTAL		.93032						
N4	X	46	A2G	.24236	.25764						
			TOTAL IN A2G		.24236						
			B2G	.20840	.29159	.00001					
			TOTAL IN B2G		.20840						
			EU	0.00000	-.00000	0.00000	-.00000	.00059	0.00000	0.00000	.54276
				.04663	0.00000	0.00000	.16810	.33442	0.00000	.00001	0.00000
			TOTAL IN EU		.44334						
			TOTAL		.89410						
N4	X	47	A2G	.25764	.24236						
			TOTAL IN A2G		.25764						
			B2G	.29159	.20836	.00004					
			TOTAL IN B2G		.29159						
			EU	0.00000	.00000	0.00000	.00006	.00198	0.00000	0.00000	.54363
				.01534	0.00000	0.00000	.13069	.30657	0.00000	-.00001	0.00000
			TOTAL IN EU		.54568						
			TOTAL		1.09491						
N4	Y	48	A1G	-.00000	.00000	-.00000	.00231	.13019	.05126	.29551	.62066
											.00002
			TOTAL IN A1G		.00231						
			B1G	-.00000	.00161	.17973	.01018	.30835	.00013		
			TOTAL IN B1G		.00161						
			EU	.00000	0.00000	-.00007	0.00000	0.00000	.00390	.00057	0.00000
											.31109
			TOTAL IN EU								
			TOTAL								

Tableau 58 (suite)

				0.00000	.02012	.43414	0.00000	0.00000	.21927	0.00000	.00387		
				TOTAL IN EU	.00451								
				TOTAL	.00842								
N4	Y	49	A1G	.00001	.00000	.00031	.01865	.34317	.00022	.12136	.62401	.00011	.00016
				TOTAL IN A1G	.01097								
				B1G	.00000	.00251	.31624	.00226	.17847	.00052			
				TOTAL IN B1G	.00251								
				EU	.00000	0.00000	.00390	0.00000	0.00000	.01167	.00612	0.00000	.65361
					0.00000	-.00013	.19684	0.00000	0.00000	.12130	0.00000	.00668	0.00000
				TOTAL IN EU	.02169								
				TOTAL	.03517								
N4	Z	50	A2U	-.00000	.18957	.31029	.00015						
				TOTAL IN A2U	.18957								
				EG	0.00000	.42223	0.00000	.57776	0.00000	.00001			
				TOTAL IN EG	.21111								
				TOTAL	.40068								
N4	Z	51	A2U	.00012	.31032	.18920	.00037						
				TOTAL IN A2U	.31044								
				EG	0.00000	.57776	0.00000	.42219	0.00000	.00005			
				TOTAL IN EG	.28888								
				TOTAL	.59932								
N4	TOTAL IN A1G			ON N4	.99994								
	TOTAL IN A2G			ON N4	.50000								
	TOTAL IN A2U			ON N4	.50000								
	TOTAL IN B1G			ON N4	.99998								
	TOTAL IN B2G			ON N4	.49999								
	TOTAL IN B2U			ON N4	0.00000								
	TOTAL IN EG			ON N4	.50000								
	TOTAL IN EU			ON N4	3.00441								
TOTAL ON N4					7.00433								
CONSIDER OVERLAPS IN BONDS LESS THAN 7.79700000 AU LONG													

Tableau 59
Analyse de population de recouvrement pour $Mg^{2+}N_4$.

MG(2+)N4,D4H,MG(2+)=(321/21/1),N=(321/21),PA59										
OVERLAP POPULATIONS										
PAGE 1										
1. FROM A1G	MOLECULAR ORBITALS									
	N1	N2	N2	N3	N3	N3	N4	N4	N4	N4
	MG(2+)	MG(2+)	N1	MG(2+)	N1	N2	MG(2+)	N1	N2	N3
3A1G	.00096	.00096	.00000	.00096	.00000	.00000	.00096	.00000	.00000	.00000
4A1G	-.00303	-.00303	.02036	-.00303	.00073	.02036	-.00303	.02036	.00073	.02036
TOTAL FROM A1G	-.00205	-.00205	.02035	-.00205	.00073	.02035	-.00205	.02035	.00073	.02035
2. FROM A2G	MOLECULAR ORBITALS									
	N1	N2	N2	N3	N3	N3	N4	N4	N4	N4
	MG(2+)	MG(2+)	N1	MG(2+)	N1	N2	MG(2+)	N1	N2	N3
1A2G	0.00000	0.00000	-.02216	0.00000	-.00006	-.02216	0.00000	-.02216	-.00006	-.02216
TOTAL FROM A2G	0.00000	0.00000	-.02216	0.00000	-.00006	-.02216	0.00000	-.02216	-.00006	-.02216
3. FROM A2U	MOLECULAR ORBITALS									
	N1	N2	N2	N3	N3	N3	N4	N4	N4	N4
	MG(2+)	MG(2+)	N1	MG(2+)	N1	N2	MG(2+)	N1	N2	N3
1A2U	.00018	.00018	.00000	.00018	.00008	.00000	.00018	.00000	.00000	.00000
2A2U	-.00018	-.00018	.00563	-.00018	.00006	.00563	-.00018	.00563	.00006	.00563
TOTAL FROM A2U	-.00001	-.00001	.00563	-.00001	.00006	.00563	-.00001	.00563	.00006	.00563
4. FROM B1G	MOLECULAR ORBITALS									
	N1	N2	N2	N3	N3	N3	N4	N4	N4	N4
	MG(2+)	MG(2+)	N1	MG(2+)	N1	N2	MG(2+)	N1	N2	N3
2B1G	.00002	.00002	-.01997	.00002	.00070	-.01997	.00002	-.01997	.00070	-.01997
TOTAL FROM B1G	.00002	.00002	-.01997	.00002	.00070	-.01997	.00002	-.01997	.00070	-.01997
5. FROM B2G	MOLECULAR ORBITALS									
	N1	N2	N2	N3	N3	N3	N4	N4	N4	N4
	MG(2+)	MG(2+)	N1	MG(2+)	N1	N2	MG(2+)	N1	N2	N3
1B2G	.00001	.00001	.02195	.00001	-.00005	.02195	.00001	.02195	-.00005	.02195
TOTAL FROM B2G	.00001	.00001	.02195	.00001	-.00005	.02195	.00001	.02195	-.00005	.02195
6. FROM B2U	MOLECULAR ORBITALS									
	N1	N2	N2	N3	N3	N3	N4	N4	N4	N4
	MG(2+)	MG(2+)	N1	MG(2+)	N1	N2	MG(2+)	N1	N2	N3
TOTAL FROM B2U	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
7. FROM EG	MOLECULAR ORBITALS									
	N1	N2	N2	N3	N3	N3	N4	N4	N4	N4
	MG(2+)	MG(2+)	N1	MG(2+)	N1	N2	MG(2+)	N1	N2	N3
1EG	.00001	0.00000	0.00000	.00001	-.00006	0.00000	0.00000	0.00000	0.00006	0.00000
2EG	0.00000	.00001	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	.00001	0.00000	-.00006	0.00000
TOTAL FROM EG	.00001	.00001	0.00000	.00001	-.00006	0.00000	.00001	0.00000	-.00006	0.00000
8. FROM EU	MOLECULAR ORBITALS									
	N1	N2	N2	N3	N3	N3	N4	N4	N4	N4
	MG(2+)	MG(2+)	N1	MG(2+)	N1	N2	MG(2+)	N1	N2	N3
3EU	.00008	.00908	.00002	.00008	.00000	.00002	.00908	.00002	-.00002	.00002
4EU	.00908	.00008	.00002	.00908	-.00002	.00002	.00008	.00002	.00000	.00002
5EU	-.00397	-.00004	.00135	-.00397	-.00141	.00135	-.00004	.00135	.00000	.00135

Tableau 59 (suite)

[illegible]

Tableau 60

Données pour PA20A du fragment MgN_4 dans une base minimum.

MGN ₄ , D ₄ H, HG=[111/11], N=[11/11], PA20A																			
1	2																		
MGNLST																			
20 26																			
3	1	1	1	2	1	1	1	2	1	1	1	2	1	1	1	2	1	1	1
15 15																			
1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
-2	3	-3	2	-2	3	-3	-2	2	3	-3	2	-2	3	-3	2	-2	3	-3	2
-3	-2	2	-3	3	2	-2	-3	3	-2	2	-3	3	2	-2	-3	3	2	-2	-3
4	4	4	-4	-4	-4	-4	-4	-4	-4	-4	-4	-4	-4	-4	-4	-4	-4	-4	-4
13	9	17	5	13	9	17	13	5	9	17	5	13	9	17	5	13	9	17	13
-14	11	-19	6	-14	11	-19	-14	6	11	-19	6	-14	11	-19	6	-14	11	-19	6
-15	-10	18	-7	15	10	-18	-15	-7	-10	18	-7	15	10	-18	-15	-7	-10	18	-7
16	12	20	-8	-16	-12	-20	-16	-8	-12	-20	-8	-16	-12	-20	-8	-16	-12	-20	-16
17	13	5	17	9	5	13	17	9	13	5	17	9	13	5	17	9	13	5	17
-18	15	-7	18	-10	7	-15	-18	-10	15	-7	18	-10	15	-7	18	-10	15	-7	18
-19	-14	6	-19	11	6	-14	-19	11	-14	6	-19	11	-14	6	-19	11	-14	6	-19
20	16	8	-20	-12	-8	-16	-20	-12	-8	-16	-20	-12	-8	-16	-20	-12	-8	-16	-20
5	17	9	13	5	17	9	5	13	17	9	13	5	17	9	5	13	17	9	13
-6	19	-11	14	-6	19	-11	-6	14	19	-11	-6	19	-11	14	-6	19	-11	14	-6
-7	-18	10	-15	7	-18	10	-7	-15	-18	10	-15	7	-18	10	-15	7	-18	10	-15
8	20	12	-16	-8	-20	-12	-8	-16	-20	-12	-8	-16	-20	-12	-8	-16	-20	-12	-8
9	5	13	9	17	13	5	9	17	5	13	9	17	13	5	9	17	13	5	13
-10	-7	-15	10	-18	15	-7	-10	-18	-7	-15	10	-18	15	-7	-10	-18	15	-7	-15
-11	-6	14	-11	19	14	-6	-11	19	-6	14	-11	19	14	-6	-11	19	14	-6	14
12	8	16	-12	-20	-16	-8	-12	-20	-8	-16	-12	-20	-16	-8	-16	-12	-20	-16	-8

Tableau 61

Données pour PA30A du fragment MgN_4 dans une base minimum.

MGN4, D4H, MG= (333/3), N= (33/3), PA30A				
2 0 0 1				
MGNLST MGNINT				
5				
MG	0.0	0.0	8.0	12.0
N1	3.898	0.0	0.0	7.0
N2	0.0	3.898	0.0	7.0
N3	-3.898	0.0	0.0	7.0
N4	0.0	-3.898	0.0	7.0
78 26				
3 3				
MG	S	650.64367	0.0680297	
MG	S	98.370780	0.3907384	
MG	S	21.322490	0.6672673	
MG	S	27.977300	-0.0867195	
MG	S	2.3265200	0.5856969	
MG	S	0.81808000	0.4864974	
MG	S	0.91134000	-0.1276505	
MG	S	0.09940000	0.6507728	
MG	S	0.03623000	0.4362719	
MG	X	23.216630	0.1214603	
MG	X	5.0022200	0.4792914	
MG	X	1.2046500	0.5989417	
MG	Y			
MG	Z			
N1	S	218.36449	0.0678703	
N1	S	32.598890	0.3902018	
N1	S	6.9173900	0.6700832	
N1	S	8.3263800	-0.0808903	
N1	S	0.65919000	0.5672020	
N1	S	0.21009000	0.5110918	
N1	X	6.1203500	0.1159195	
N1	X	1.2593800	0.4699582	
N1	X	0.29145000	0.6184476	
N1	Y			9
N1	Z			9
N2	S			7
N2	S			8
N2	X			9
N2	Y			9
N2	Z			9
N3	S			7
N3	S			8
N3	X			9
N3	Y			9
N3	Z			9
N4	S			7
N4	S			8
N4	X			9
N4	Y			9
N4	Z			9

Données pour PA40 du fragment MgN_4 dans une base minimum.

MGN4, D4 H, MG = (333/3), N = (33/3), PA40

Tableau 63
Energies relatives à l'itération 12 pour MgN_4 .

MGN4, D4H, MG=(333/3), N=(33/3), PA40			
PA40 CLOSED SHELL HARTREE-FOCK SELF-CONSISTENT-FIELD L.C.A.O. METHOD			
RESULTS OF ITERATION 12			
	PRESENT ITERATION	PREVIOUS ITERATION	CHANGE
KINETIC ENERGY, T =	416.5487290512	416.5487307423	-.0000016911
ONE ELECTRON POTENTIAL ENERGY, V(1) =	-1257.4616367689	-1257.4616412168	.0000044479
ONE ELECTRON ENERGY, H = T+V(1) =	-840.9129077178	-840.9129104746	.0000027568
TWO ELECTRON POTENTIAL ENERGY, V(1,2) =	293.0480970363	293.0480997931	-.0000027568
ELECTRONIC POTENTIAL ENERGY, V(E) = V(1)+V(1,2) =	-964.4135397327	-964.4135414238	.0000016911
ELECTRONIC ENERGY, E(E) = H+V(1,2) =	-547.8648106815	-547.8648106815	-.0000000000
NUCLEAR REPULSION ENERGY, V(N) =	134.3234810448	134.3234810448	
POTENTIAL ENERGY, V = V(E)+V(N) =	-830.0900586879	-830.0900603790	.0000016911
VIRIAL, -V/T =	1.9927801978	1.9927801938	
TOTAL ENERGY, E = E(E)+V(N) =	-413.5413296367	-413.5413296367	-.0000000000
ORBITAL ENERGIES (VALUES OF PREVIOUS ITERATION IN PARENTHESES)			
1. A1G ORBITALS, (6) (1 - 6)			
-48.93752721 (-48.93752690)	-15.30731834 (-15.30731792)	-3.98145621 (-3.98145586)	-.92652195 (-.92652162)
-.02443595 (-.02443548)	.28363615 (.28363645)		
2. A2G ORBITALS, (1) (7 - 7)			
-.32000948 (-.32000954)			
3. A2U ORBITALS, (2) (8 - 9)			
-2.47438290 (-2.47438256)	-.29811186 (-.29811162)		
4. B1G ORBITALS, (3) (10 - 12)			
-15.30539831 (-15.30539789)	-.87453194 (-.87453172)	.16812687 (.16812724)	
5. B2G ORBITALS, (1) (13 - 13)			
-.39170087 (-.39170083)			
6. B2U ORBITALS, (1) (14 - 14)			
-.10189778 (-.10189754)			
7. EG ORBITALS, (2) (15 - 16)			
-.26321947 (-.26321923)	-.26321947 (-.26321923)		
8. EU ORBITALS, (10) (17 - 26)			
-15.30500655 (-15.30500614)	-15.30500655 (-15.30500614)	-2.47466875 (-2.47466840)	-2.47466875 (-2.47466840)
-.89599333 (-.89599306)	-.89599333 (-.89599306)	-.35681008 (-.35681003)	-.35681008 (-.35681003)
.13987194 (.13987232)	.13987194 (.13987232)		
COMPUTED ENERGY ELAPSED TIME = .173 SECONOS			
FINISHED SCF ELAPSED TIME = .003 SECONOS			

Tableau 64
OM de l'itération 12 pour MgN_4 .

MGN4, D4H, MG=(333/3), N=(33/3), PA40										
MOLECULAR ORBITALS										
ITERATION 12										
ROW	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
1A1G	-48.9375272	1.000000								
1	.9899875	.0412796	-.0079041	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.0001212	.0016410	-.0001566	0.0000000
	0.0000000	-.0001212	.0016410	0.0000000	-.0001566	0.0000000	-.0001212	.0016410	.0001566	0.0000000
	0.0000000	-.0001212	.0016410	0.0000000	.0001566	0.0000000				
2A1G	-15.3073183	1.000000								
2	-.0004101	.0015074	-.0178040	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.4956283	.0225158	-.0020843	0.0000000
	0.0000000	.4956283	.0225158	0.0000000	-.0020843	0.0000000	.4956283	.0225158	.0020843	0.0000000
	0.0000000	.4956283	.0225158	0.0000000	.0020843	0.0000000				
3A1G	-3.9814562	1.000000								
3	-.2694668	1.0242332	.0051075	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.0002692	.0004519	-.0011418	0.0000000
	0.0000000	-.0002692	.0004519	0.0000000	-.0011418	0.0000000	-.0002692	.0004519	.0011418	0.0000000
	0.0000000	-.0002692	.0004519	0.0000000	.0011418	0.0000000				
4A1G	-.9265219	1.000000								
4	-.0154570	.0787184	-.1101716	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.1114517	-.4651734	.0451529	0.0000000
	0.0000000	.1114517	-.4651734	0.0000000	.0451529	0.0000000	.1114517	-.4651734	-.0451529	0.0000000
	0.0000000	.1114517	-.4651734	0.0000000	-.0451529	0.0000000				
5A1G	-.0244360									
5	-.0432935	.2051452	-.8461222	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.0491319	.3166283	-.2491781	0.0000000
	0.0000000	-.0491319	.3166283	0.0000000	.2491781	0.0000000	-.0491319	.3166283	-.2491781	0.0000000
	0.0000000	-.0491319	.3166283	0.0000000	-.2491781	0.0000000				
6A1G	.2836361									
6	.0281369	-.1190411	1.0299916	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.0315875	-.2637615	.4643004	0.0000000
	0.0000000	.0315875	-.2637615	0.0000000	.4643004	0.0000000	.0315875	-.2637615	-.4643004	0.0000000
	0.0000000	.0315875	-.2637615	0.0000000	-.4643004	0.0000000				
1A2G	-.3200095	1.000000								
7	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.4000000	.5113586
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.5113586	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.5113586
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.5113586	0.0000000	0.0000000				
1A2U	-2.4743829	1.000000								
8	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.9998997	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	.0030984	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.0030984	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	.0030984	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.0030984				
2A2U	-.2981119	1.000000								
9	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.0192233	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	.4976342	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.4976342	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	.4976342	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.4976342				
1B1G	-15.3053983	1.000000								
10	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-.4960134	-.0185843	.6004854	0.0000000
	0.0000000	.4960134	.0185843	0.0000000	-.0004854	0.0000000	-.4960134	-.0185843	-.0004854	0.0000000
	0.0000000	.4960134	.0185843	0.0000000	.0004854	0.0000000				
2B1G	-.8745319	1.000000								
11	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.1198752	-.5170866	.6402708	0.0000000
	0.0000000	-.1198752	.5170866	0.0000000	-.0402708	0.0000000	.1198752	-.5170866	-.0402708	0.0000000
	0.0000000	-.1198752	.5170866	0.0000000	.0402708	0.0000000				

Tableau 64 (suite)

3B1G -1.1681269 1.000000										
12	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0056887	-0.0235804	-0.5097942	0.0000000
	0.0000000	-0.0056887	0.0235804	0.0000000	-0.5097942	0.0000000	0.0056887	-0.0235804	-0.5097942	0.0000000
	0.0000000	-0.0056887	0.0235804	0.0000000	-0.5097942	0.0000000				
1B2G -0.3917009 1.000000										
13	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.4893918
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.4893918	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-0.4893918
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-0.4893918	0.0000000	0.0000000				
1B2U -0.1018978										
14	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	0.5024054	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-0.5024054	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	0.5024054	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-0.5024054				
1EG -0.2632195 1.000000										
15	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	0.7071261	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	-0.7071261	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000				
2EG -0.2632195 1.000000										
16	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.7071261	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-0.7071261				
1EU -0.15.3050066 1.000000										
17	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-0.0008826	0.0000000	0.0000000	0.7015949	0.0256479	-0.0000222	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-0.0007122	0.0000000	0.0000000	-0.7015949	-0.0256479	-0.0000222	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-0.0007122	0.0000000	0.0000000				
2EU -0.15.3050066 1.000000										
18	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-0.0008826	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-0.0007122
	0.0000000	0.7015949	0.0256479	0.0000000	-0.0000222	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-0.0007122
	0.0000000	-0.7015949	-0.0256479	0.0000000	-0.0000222	0.0000000				
3EU -2.4746688 1.000000										
19	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.9979280	0.0000000	0.0000000	-0.0032473	0.0137233	-0.0137835	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0027094	0.0000000	0.0000000	0.0032473	-0.0137233	-0.0137835	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0027094	0.0000000	0.0000000				
4EU -2.4746688 1.000000										
20	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.9979280	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0027094
	0.0000000	-0.0032473	0.0137233	0.0000000	-0.0137835	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0027094
	0.0000000	0.0032473	-0.0137233	0.0000000	-0.0137835	0.0000000				
5EU -0.8959933 1.000000										
21	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-0.0538747	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0220746
	0.0000000	-0.1665852	0.7170489	0.0000000	-0.0656036	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0220746
	0.0000000	0.1665852	-0.7170489	0.0000000	-0.0656036	0.0000000				
6EU -0.8959933 1.000000										
22	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-0.0538747	0.0000000	0.0000000	-0.1665852	0.7170489	-0.0656036	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0220746	0.0000000	0.0000000	0.1665852	-0.7170489	-0.0656036	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0220746	0.0000000	0.0000000				
7EU -0.3568101 1.000000										
23	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0156486	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-0.7041466
	0.0000000	-0.0118939	0.0522228	0.0000000	0.0430687	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-0.7041466
	0.0000000	0.0118939	-0.0522228	0.0000000	0.0430687	0.0000000				
8EU -0.3568101 1.000000										
24	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-0.0156486	0.0000000	0.0000000	0.0118939	-0.0522228	-0.0430687	0.0000000
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.7041466	0.0000000	0.0000000	-0.0118939	0.0522228	-0.0430687	0.0000000

Tableau 64 (suite)

	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.7041466	0.0000000	0.0000000			
9EU		.1398719							
25	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.0720371	0.0000000	0.0000000	-.0143447	.0613845	.7045501
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.0693019	0.0000000	0.0000000	.0143447	-.0613845	.7045501
	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.0693019	0.0000000	0.0000000			
10EU		.1398719							
26	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.0720371	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.0693019
	0.0000000	-.0143447	.0613845	0.0000000	.7045501	0.0000000	0.0000000	0.0000000	.0693019
	0.0000000	.0143447	-.0613845	0.0000000	.7045501	0.0000000			
MOLECULAR ORBITALS PUNCHED									

Tableau 65

Analyse de population de Mulliken pour MgN_4 .

MULLIKEN POPULATION ANALYSIS												
MGN ₄ , D ₄ h, MG=(333/3), N=(33/3), PA59												
				1	2	3	4	5	6	7	8	9
MG	S	1	AIG	1.97845	.00000	.02084	.00006	.00046	.00018			
			TOTAL IN AIG		1.99936							
MG	S	2	AIG	.02170	.00000	1.97643	.00061	.00134	-.00008			
			TOTAL IN AIG		1.99874							
MG	S	3	AIG	-.00018	-.00206	.00223	.14131	1.04553	.81317			
			TOTAL IN AIG		.14130							
MG	X	4	EU	-.00000	0.00000	1.99509	0.00000	0.00000	.00226	0.00000	.00015	.00249
			TOTAL IN EU		1.99751							
MG	Y	5	EU	0.00000	-.00000	0.00000	1.99509	.00226	0.00000	.00015	0.00000	.00249
			TOTAL IN EU		1.99751							
MG	Z	6	A2U	1.99976	.00024							
			TOTAL IN A2U		2.00000							
MG	TOTAL IN AIG			ON MG	4.13939							
	TOTAL IN A2G			ON MG	0.00000							
	TOTAL IN A2U			ON MG	2.00000							
	TOTAL IN B1G			ON MG	0.00000							
	TOTAL IN B2G			ON MG	0.00000							
	TOTAL IN B2U			ON MG	0.00000							
	TOTAL IN EG			ON MG	0.00000							
	TOTAL IN EU			ON MG	3.99501							
	TOTAL ON MG				10.13441							

Tableau 65 (suite)

MULLIKEN POPULATION ANALYSIS													
MGN4,D4H, MG=(333/3), N=(33/3), PA59													
				1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
N1	S	7	AIG	-.00000	.49528	.00000	.00373	.00071	.00028				
			TOTAL IN AIG		.49901								
			B1G	.49569	.00430	.00001							
			TOTAL IN B1G		.49999								
			EU	.99150	0.00000	.00000	0.00000	0.00000	.00031	0.00000	.00004	.00006	0.00000
			TOTAL IN EU		.99994								
			TOTAL		1.99893								
N1	S	8	AIG	.00001	.00524	.00002	.45376	.04502	-.00484				
			TOTAL IN AIG		.45902								
			B1G	.00431	.49391	.00178							
			TOTAL IN B1G		.49822								
			EU	.00042	0.00000	.00000	0.00000	0.00000	.98014	0.00000	.00208	.00768	0.00000
			TOTAL IN EU		.99232								
			TOTAL		1.94955								
N1	X	9	AIG	.00000	.00000	.00010	.00702	.19164	.30124				
			TOTAL IN AIG		.00712								
			B1G	-.00000	.00188	.49820							
			TOTAL IN B1G		.00180								
			EU	-.00000	0.00000	.00151	0.00000	0.00000	.00835	0.00000	.00573	.98441	0.00000
			TOTAL IN EU		.01559								
			TOTAL		.02451								
N1	Y	10	A2G	.50000									
			TOTAL IN A2G		.50000								
			B2G	.50000									
			TOTAL IN B2G		.50000								
			EU	0.00000	-.00000	0.00000	.00005	.00207	0.00000	.99127	0.00000	0.00000	.00660
			TOTAL IN EU		.99340								
			TOTAL		1.99340								
N1	Z	11	A2U	.00006	.49994								
			TOTAL IN A2U		.50000								
			EG	1.00000	0.00000								
			TOTAL IN EG		1.00000								
			TOTAL		1.50000								
N1	TOTAL IN AIG			ON N1	.96515								
	TOTAL IN A2G			ON N1	.50000								
	TOTAL IN A2U			ON N1	.50000								
	TOTAL IN B1G			ON N1	1.00000								
	TOTAL IN B2G			ON N1	.50000								
	TOTAL IN B2U			ON N1	0.00000								
	TOTAL IN EG			ON N1	1.00000								
	TOTAL IN EU			ON N1	3.00125								
	TOTAL ON N1				7.46640								

Tableau 65 (suite)

MULLIKEN POPULATION ANALYSIS													
MGN4,D4H,MG=(333/3),N=(33/3),PA59													
				1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
N2	S	12	AIG	-.00000	.49528	.00000	.00373	.00071	.00026				
			TOTAL IN AIG		.49901								
			B1G	.49569	.00430	.00001							
			TOTAL IN B1G		.49999								
			EU	0.00000	.99158	0.00000	.00000	.00831	0.00000	.00004	0.00000	0.00000	.00006
			TOTAL IN EU		.99994								
			TOTAL		1.99893								
N2	S	13	AIG	.00001	.06524	.00002	.45376	.04582	-.00484				
			TOTAL IN AIG		.45902								
			B1G	.00431	.49391	.00178							
			TOTAL IN B1G		.49822								
			EU	0.00000	.00842	0.00000	.00088	.98814	0.00000	.00288	0.00000	0.00000	.08768
			TOTAL IN EU		.99232								
			TOTAL		1.94255								
N2	X	14	A2G	.50000									
			TOTAL IN A2G		.50000								
			B2G	.50000									
			TOTAL IN B2G		.50000								
			EU	-.00000	0.00000	.00005	0.00000	0.00000	.00207	0.00000	.99127	.00668	0.00000
			TOTAL IN EU		.99340								
			TOTAL		1.99340								
N2	Y	15	AIG	.00000	.00000	.00010	.00702	.19164	.30124				
			TOTAL IN AIG		.00712								
			B1G	-.00000	.00180	.49820							
			TOTAL IN B1G		.00180								
			EU	0.00000	-.00000	0.00000	.00151	.00835	0.00000	.00573	0.00000	0.00000	.98441
			TOTAL IN EU		.01559								
			TOTAL		.02451								
N2	Z	16	A2U	.00006	.49994								
			TOTAL IN A2U		.50000								
			EG	0.00000	1.00000								
			TOTAL IN EG		1.00000								
			TOTAL		1.50000								
N2	TOTAL IN AIG			ON N2	.96515								
	TOTAL IN A2G			ON N2	.50000								
	TOTAL IN A2U			ON N2	.50000								
	TOTAL IN B1G			ON N2	1.00000								
	TOTAL IN B2G			ON N2	.50000								
	TOTAL IN B2U			ON N2	0.00000								
	TOTAL IN EG			ON N2	1.00000								
	TOTAL IN EU			ON N2	3.00125								
	TOTAL ON N2				7.46640								

Tableau 65 (suite)

MULLIKEN POPULATION ANALYSIS												
MGN4, D4H, MG= (333/3), N= (33/3), PA59												
				1	2	3	4	5	6	7	8	9
N3	S	17	AIG	-.00000	.49528	.00000	.00373	.00071	.00028			
			TOTAL IN AIG		.49901							
			B1G	.49569	.00430	.00001						
			TOTAL IN B1G		.49999							
			EU	.99158	0.00000	.00000	0.00000	0.00000	.00031	0.00000	.00004	.00006
			TOTAL IN EU		.99994							
			TOTAL		1.99893							
N3	S	18	AIG	.00001	.00524	.00002	.45376	.04582	-.00484			
			TOTAL IN AIG		.45902							
			B1G	.00431	.49391	.00178						
			TOTAL IN B1G		.49822							
			EU	.00842	0.00000	.00088	0.00000	0.00000	.98014	0.00000	.00288	.00768
			TOTAL IN EU		.99232							
			TOTAL		1.94955							
N3	X	19	AIG	.00000	.00000	.00010	.00702	.19164	.30124			
			TOTAL IN AIG		.00712							
			B1G	-.00000	.00180	.49820						
			TOTAL IN B1G		.00180							
			EU	-.00000	0.00000	.00151	0.00000	0.00000	.00035	0.00000	.00573	.98441
			TOTAL IN EU		.01559							
			TOTAL		.02451							
N3	Y	20	A2G	.50000								
			TOTAL IN A2G		.50000							
			B2G	.50000								
			TOTAL IN B2G		.50000							
			EU	0.00000	-.00000	0.00000	.00005	.00207	0.00000	.99127	0.00000	0.00000
			TOTAL IN EU		.99340							
			TOTAL		1.99340							
N3	Z	21	A2U	.00006	.49994							
			TOTAL IN A2U		.50000							
			EG	1.00000	0.00000							
			TOTAL IN EG		1.00000							
			TOTAL		1.50000							
N3	TOTAL IN AIG ON N3				.96515							
	TOTAL IN A2G ON N3				.50000							
	TOTAL IN A2U ON N3				.50000							
	TOTAL IN B1G ON N3				1.00000							
	TOTAL IN B2G ON N3				.50000							
	TOTAL IN B2U ON N3				0.00000							
	TOTAL IN EG ON N3				1.00000							
	TOTAL IN EU ON N3				3.00125							
	TOTAL ON N3				7.46640							

Tableau 65 (suite)

MULLIKEN POPULATION ANALYSIS													
MGN4,D4H,MG=(333/3),N=(33/3),PA59													
				1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
N4	S	22	AIG	-.00000	.49528	.00000	.00373	.00071	.00028				
			TOTAL IN AIG		.49901								
			B1G	.49569	.00430	.00001							
			TOTAL IN B1G		.49999								
			EU	0.00000	.99158	0.00000	.00000	.00831	0.00000	.00004	0.00000	0.00000	.00006
			TOTAL IN EU		.99994								
			TOTAL		1.99893								
N4	S	23	AIG	.00001	.00524	.00002	.45376	.04582	-.00484				
			TOTAL IN AIG		.45902								
			B1G	.00431	.49391	.00178							
			TOTAL IN B1G		.49822								
			EU	0.00000	.00842	0.00000	.00088	.98814	0.00000	.00288	0.00000	0.00000	.00768
			TOTAL IN EU		.99232								
			TOTAL		1.94955								
N4	X	24	A2G	.50000									
			TOTAL IN A2G		.50000								
			B2G	.50000									
			TOTAL IN B2G		.50000								
			EU	-.00000	0.00000	.00005	0.00000	0.00000	.00207	0.00000	.99127	.00660	0.00000
			TOTAL IN EU		.99340								
			TOTAL		1.99340								
N4	Y	25	AIG	.00000	.00000	.00010	.00702	.19164	.30124				
			TOTAL IN AIG		.00712								
			B1G	-.00000	.00180	.49820							
			TOTAL IN B1G		.00180								
			EU	0.00000	-.00000	0.00000	.00151	.00835	0.00000	.00573	0.00000	0.00000	.98441
			TOTAL IN EU		.01559								
			TOTAL		.02451								
N4	Z	26	A2U	.00006	.49994								
			TOTAL IN A2U		.50000								
			EG	0.00000	1.00000								
			TOTAL IN EG		1.00000								
			TOTAL		1.50000								
N4	TOTAL IN AIG			ON N4	.96515								
	TOTAL IN A2G			ON N4	.50000								
	TOTAL IN A2U			ON N4	.50000								
	TOTAL IN B1G			ON N4	1.00000								
	TOTAL IN B2G			ON N4	.50000								
	TOTAL IN B2U			ON N4	0.00000								
	TOTAL IN EG			ON N4	1.00000								
	TOTAL IN EU			ON N4	3.00125								
	TOTAL ON N4			ON N4	7.46640								

CONSIDER OVERLAPS IN BONDS LESS THAN 7.79700000 AU LONG

Tableau 66
Analyse de population de recouvrement pour MgN_4 .

MGN4, D4H, MG= (333/3), N= (33/3), PA59										
OVERLAP POPULATIONS										
PAGE 1										
1. FROM AIG	MOLECULAR	ORBITALS								
	N1	N2	N2	N3	N3	N3	N4	N4	N4	N4
	MG	MG	N1	MG	N1	N2	MG	N1	N2	N3
2AIG	-.00134	-.00134	.00005	-.00134	.00000	.00005	-.00134	.00005	.00000	.00005
3AIG	.00024	.00024	.00000	.00024	.00000	.00000	.00024	.00000	.00000	.00000
4AIG	.05657	.05657	.01522	.05657	.00053	.01522	.05657	.01522	.00053	.01522
TOTAL FROM AIG	.05547	.05547	.01520	.05547	.00053	.01520	.05547	.01520	.00053	.01520
2. FROM A2G	MOLECULAR	ORBITALS								
	N1	N2	N2	N3	N3	N3	N4	N4	N4	N4
	MG	MG	N1	MG	N1	N2	MG	N1	N2	N3
1A2G	0.00000	0.00000	-.02295	0.00000	-.00006	-.02295	0.00000	-.02295	-.00006	-.02295
TOTAL FROM A2G	0.00000	0.00000	-.02295	0.00000	-.00006	-.02295	0.00000	-.02295	-.00006	-.02295
3. FROM A2U	MOLECULAR	ORBITALS								
	N1	N2	N2	N3	N3	N3	N4	N4	N4	N4
	MG	MG	N1	MG	N1	N2	MG	N1	N2	N3
1A2U	.00000	.00000	.00000	.00000	.00000	.00000	.00000	.00000	.00000	.00000
2A2U	-.00025	-.00025	.00476	-.00025	.00005	.00476	-.00025	.00476	.00005	.00476
TOTAL FROM A2U	-.00017	-.00017	.00476	-.00017	.00005	.00476	-.00017	.00476	.00005	.00476
4. FROM B1G	MOLECULAR	ORBITALS								
	N1	N2	N2	N3	N3	N3	N4	N4	N4	N4
	MG	MG	N1	MG	N1	N2	MG	N1	N2	N3
2B1G	0.00000	0.00000	-.01808	0.00000	.00062	-.01808	0.00000	-.01808	.00062	-.01808
TOTAL FROM B1G	0.00000	0.00000	-.01811	0.00000	.00062	-.01811	0.00000	-.01811	.00062	-.01811
5. FROM B2G	MOLECULAR	ORBITALS								
	N1	N2	N2	N3	N3	N3	N4	N4	N4	N4
	MG	MG	N1	MG	N1	N2	MG	N1	N2	N3
1B2G	0.00000	0.00000	.02102	0.00000	-.00005	.02102	0.00000	.02102	-.00005	.02102
TOTAL FROM B2G	0.00000	0.00000	.02102	0.00000	-.00005	.02102	0.00000	.02102	-.00005	.02102
6. FROM B2U	MOLECULAR	ORBITALS								
	N1	N2	N2	N3	N3	N3	N4	N4	N4	N4
	MG	MG	N1	MG	N1	N2	MG	N1	N2	N3
TOTAL FROM B2U	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
7. FROM EG	MOLECULAR	ORBITALS								
	N1	N2	N2	N3	N3	N3	N4	N4	N4	N4
	MG	MG	N1	MG	N1	N2	MG	N1	N2	N3
1EG	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	-.00011	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
2EG	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	-.00011	0.00000
TOTAL FROM EG	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	-.00011	0.00000	0.00000	0.00000	-.00011	0.00000
8. FROM EU	MOLECULAR	ORBITALS								
	N1	N2	N2	N3	N3	N3	N4	N4	N4	N4
	MG	MG	N1	MG	N1	N2	MG	N1	N2	N3
3EU	.00330	.00007	.00000	.00330	-.00000	.00000	.00007	.00000	.00000	.00000
4EU	.00007	.00330	.00000	.00007	.00000	.00000	.00330	.00000	-.00000	.00000

Tableau 66 (suite)

5EU	-.00003	-.00351	.00112	-.00003	.00000	.00112	-.00351	.00112	-.00123	.00112
6EU	-.00351	-.00003	.00112	-.00351	-.00123	.00112	-.00003	.00112	.00000	.00112
7EU	-.00029	-.00005	-.00028	-.00029	.00011	-.00028	-.00005	-.00028	.00000	-.00028
8EU	-.00005	-.00029	-.00028	-.00005	.00000	-.00028	-.00029	-.00028	.00011	-.00028
TOTAL FROM										
EU	-.00051	-.00051	.00167	-.00051	-.00113	.00167	-.00051	.00167	-.00113	.00167
TOTAL FROM ALL MOLECULAR ORBITALS										
	N1	N2	N2	N3	N3	N3	N4	N4	N4	N4
	HG	HG	N1	HG	N1	N2	HG	N1	N2	N3
OVERLAP CHARGE	.05480	.05480	.00167	.05480	-.00014	.00167	.05480	.00167	-.00014	.00167
DISTANCE (AU)	3.89800	3.89800	5.51260	3.89800	7.79600	5.51260	3.89800	5.51260	7.79600	5.51260

CHAPITRE IV

DISCUSSION

L'erreur implicite de la méthode HF, appelée corrélation électronique, provient de la représentation des interactions interélectroniques en potentiels de Coulomb et d'échange. Elle est d'environ 1 % pour l'énergie totale du système. Elle est encore plus importante lorsque l'on considère des différences d'énergie qui sont des quantités plus directement liées à des valeurs expérimentales.

Des méthodes exposées à la section I.B seule la méthode des fragments est du type ab initio utilisant une base (FGSF) déterminée par le biais des fragments. La base ici utilisée (FG) a été déterminée par le biais des atomes respectifs.

Les OM calculées pour un fragment sont les parties constituantes de la fonction d'onde de ce système. Il est plus facile d'interpréter cette fonction d'onde par le biais d'analyses de population de Mulliken et de recouvrement. Il faut cependant être conscient du fait que les résultats d'analyses de population sont dépendants de la base utilisée. Ainsi les valeurs absolues des populations électroniques sont parfois plus ou moins significatives. Cependant, leur comportement pour montrer certaines règles au niveau d'une famille de composés ou encore pour différentes géométries d'une même molécule peut être très révélateur.

Considérons le fragment MgN_4 plan. Dans la base minimum, l'état fondamental est du type "closed-shell" avec une énergie totale de $-413,541$ u.a. On constate que l'environnement des quatre azotes induit une charge résiduelle de $+1,87$ sur l'atome de magnésium, le fragment dans son ensemble étant électriquement neutre. Chacun des azotes porte une charge de $-0,47$. L'analyse de population de recouvrement montre que l'OM $4a_{1g}$ a un certain caractère liant notable ($0,29$) comparativement à l'OM $1b_{2g}$ ($0,084$) et aux OM à caractère antiliant $1a_{2g}$ ($-0,092$) et $2b_{1g}$ ($-0,074$). Les autres OM sont à caractère non liant. Les populations de recouvrement des "liaisons" Mg-N et de N-N étant de $0,055$ et $0,002$ respectivement, le type d'interaction est essentiellement ionique.

Considérons le fragment Mg^{2+}N_4 . Dans la base minimum, la configuration électronique produisant la plus basse énergie ($-412,839$) est du type "open-shell" en comparaison avec $-412,650$ pour la configuration électronique "closed-shell fondamentale". Un autre calcul "closed-shell" ($-412,649$) et deux autres calculs "open-shell" ($-412,490$ et $-412,801$) ont été effectués montrant les écarts d'énergie faibles pour différentes configurations du même type et de types différents. Pour la configuration électronique donnant la plus basse énergie, les populations atomiques ($\text{Mg}^{2+} = +2,006$ et $\text{N} = -0,001$) et de recouvrement ($\text{mg}^{2+}\text{-N} = -0,004$ et $\text{N-N} = 0,003$) confèrent une très faible interaction de type ionique. L'analyse de population de recouvrement des OM montre que l'OM $4a_{1g}$ ($0,063$) a maintenant un ca-

ractère liant de même grandeur que l'OM $1b_{2g}$ (0,084) et que les OM à caractère antiliant $1a_{2g}$ (-0,092) et $2b_{1g}$ (-0,076). La population de recouvrement pour Mg^{2+} -N est plus faible que pour Mg-N, mais le transfert de charge sur les quatre azotes du fragment MgN_4 doit être responsable de cette différence.

Dans la base de valence divisée avec une fonction de polarisation sur l'atome de magnésium, les énergies totales des configurations "closed-shell fondamentale" (-412,852) et "open-shell" fondamentale (-413,036) ne sont abaissées que sensiblement par rapport à la base minimum. Les analyses de population fournissent des résultats semblables pour ces deux configurations, soient $Mg^{2+} = +2,018$, $N = -0,004$, Mg^{2+} -N = 0,003 et N-N = 0,007 pour celle du type "closed-shell" et, $Mg^{2+} = +2,017$, $N = -0,004$, Mg^{2+} -N = 0,003 et N-N = 0,013 pour celle du type "open-shell", la plus grande population de recouvrement N-N correspondant à la configuration de plus basse énergie.

Considérons le fragment $Mg^{2+}N_4O$ avec les quatre azotes dans le même plan que l'atome de magnésium. Dans la base minimum, l'état fondamental est du type "closed-shell" avec une énergie totale de -486,940. Le calcul dans la base de valence divisée avec une fonction de polarisation sur le magnésium n'abaisse cette énergie que sensiblement (-487,112). L'ajout d'un atome d'oxygène à $Mg^{2+}N_4$ modifie certaines charges résiduelles. Ainsi la charge que porte l'atome de magnésium reste pratiquement inchangée (+2,014), les azotes assument maintenant des charges positives (+0,068) en comparaison avec les charges essentielle-

ment nulles (-0,004) dans Mg^{2+}N_4 . L'atome d'oxygène porte une charge notable négative (-0,29) pour produire un moment dipolaire sur l'axe $\text{Mg}^{2+}-\text{O}$ ($\mu = -8,499$ u.a.). L'analyse des populations de recouvrement pour les OM montre que les OM $7a_1$ (0,066) et $1b_2$ (0,086) possèdent un certain caractère liant et que les OM $1a_2$ (-0,087) et $2b_1$ (-0,075) possèdent un certain caractère antiliant, toutes les autres OM étant non liantes. Les faibles populations de recouvrement pour les "liaisons" $\text{Mg}^{2+}-\text{N}$ (0,002), $\text{Mg}^{2+}-\text{O}$ (-0,002), $\text{N}-\text{N}$ (0,014) et $\text{N}-\text{O}$ (0,036) suggèrent des interactions essentiellement ioniques. Ainsi l'approche d'une molécule d'eau du fragment Mg^{2+}N_4 ne devrait pratiquement pas perturber la charge sur l'ion Mg^{2+} .

Considérons le fragment $\text{Mg}^{2+}\text{N}_4\text{O}$ avec les quatres azotes dans un plan sous l'atome de magnésium. En comparaison avec l'énergie de la conformation précédente (-487,112), la conformation pyramidale est énergétiquement moins favorisée (-487,048). Aussi, la charge résiduelle sur l'oxygène devient plus négative (-0,31) et les charges des azotes deviennent plus positives (+0,073) avec aucune variation sur l'atome de magnésium (+2,014). Il en résulte une augmentation du moment dipolaire ($\mu = -9,110$ u.a.).

Le cycle porphyrinique n'étant pas considéré, la comparaison avec des calculs de molécules de la famille de la chlorophylle ne convient pas.

L'angle de la "liaison" $\text{Mg}-\text{O}$ avec le plan moléculaire ainsi que l'optimisation de l'exposant de la fonction de polarisation du Mg^{2+} pourraient être des perspectives de recherche.

BIBLIOGRAPHIE

Textes généraux:

Levine, I.N. Quantum Chemistry, (3rd ed.). Allyn and Bacon, Boston, 1983.

Lowe, J.P. Quantum Chemistry. Academic Press, New York, 1978.

Pilar, F.L. Elementary Quantum Chemistry. McGraw-Hill, New-York, 1968.

Schaefer, H.F. (ed.) Methods of Electronic Structure Theory (vol. 3 of Modern Theoretical Chemistry), Plenum, New York, 1977.

Steiner, E. The determination and interpretation of molecular wave functions. Cambridge University Press, Cambridge, 1976.

Références:

Berezin, B.D. (1981), Coordination compounds of porphyrins and phthalocyanines. John Wiley and Sons, 1.

Blinder, S.M. (1965), Basic concepts of self-consistent-field theory. American Journal of Physics, 33, 431.

Boys, S.F. (1950), Electronic wave functions, I. A general method of calculation for stationary states of any molecular system. Proceedings of the Royal Society of London, Serie A, 200, 542.

- Christoffersen, R.E., Maggiora, G.M. (1969), Ab initio calculations on large molecules using molecular fragments. Preliminary investigations. Chemical Physics Letters, 3, 6, 419.
- Clementi, E., Davis, D.R. (1966), Electronic structure of large molecular systems. Journal of Computational Physics, 1, 223.
- Cotton, F.A., Wilkinson, F.R.S.G. (1972), Advanced Inorganic Chemistry, Interscience Publishers, New York, 218.
- Huzinaga, S., Andzelm, J., Klobukowski, M., Radzio-Andzelm, E., Sakai, Y., Tatewaki, H. (1984), Gaussian Basis Sets for Molecular Calculations, Elsevier, Amsterdam.
- Kratky, C., Dunitz, J.D. (1977), Ordered aggregation states of Chlorophyll a and some derivatives. Journal of Molecular Biology, 113, 431.
- Maggiora, G.M. (1973), Electronic structure of porphyrins. All valence electron self-consistent field molecular orbital calculations of free base, Magnesium, and Aquomagnesium porphines. Journal of the American Chemical Society, 95, 20, 9555.

- Newmann, D.B., Basch, H., Kornegay, R.L., Snyder, L.C., Moskowitz, J.W., Hornback, C., Liebmann, S.P. (1971), The POLYATOM (version 2) system of programs for quantitative theoretical chemistry. Quantum Chemistry Program Exchange #199. Bloomington, Indiana, U.S.A.
- Petke, J.D., Maggiora, G.M., Shipman, L.L., Christoffersen, R.E. (1978), Stereoelectronic properties of photosynthetic and related systems. Ab initio configuration interaction calculations on the ground and lower excited singlet and triplet states of magnesium chlorin and chlorin. Journal of Molecular Spectroscopy, 73, 311.
- Roothaan, C.C.J. (1951), New developments in molecular orbital theory. Reviews of Modern Physics, 23, 2, 69.
- Roothaan, C.C.J. (1960), Self-consistent field theory for open-shells of electronic systems. Reviews of Modern Physics, 32, 2, 179.
- Slater, J.C. (1930), Atomic shielding constants. Physical Review, 36, 57.
- Spangler, D., McKinney, R., Christoffersen, R.E., Maggiora, M., Shipman, G.M., Shipman, L.L. (1975), Ab initio calculations on large molecules using molecular fragments. Preliminary investigation of ethyl chlorophyllide a and related molecules. Chemical Physics Letters, 36, 4, 427.

Taketa, H., Huzinaga, S. O-Ohata, K.. (1966), Gaussian expansion methods for molecular integrals. Journal of the Physical Society of Japan, 21, 2313.

Zerner, M., Gouterman, M. (1967), Extented Hückel calculations on alkaline earth complexes. Theoritica Chmica Acta, 8, 26.

ANNEXE A

Système du type "open-shell".

Pour une grande classe d'états du type "open-shell", contenant un seul sous-niveau "open-shell" dont les orbitales sont de même dégénérescence, l'énergie peut s'exprimer comme,

$$\begin{aligned}
 E = & 2 \sum_k H_k + \sum_{kl} (2J_{kl} - K_{kl}) \\
 & + \gamma \left[2 \sum_m H_m + \gamma \sum_{mm} (2aJ_{mm} - bK_{mm}) \right. \\
 & \left. + 2 \sum_{km} (2J_{km} - K_{km}) \right] \quad (A.1)
 \end{aligned}$$

où γ est l'occupation fractionnaire des orbitales de spin du type "open-shell" et, a et b sont des constantes dépendant du cas étudié.

Par le biais de quelques transformations (Roothaan, 1960) l'application du théorème variationnel sur(A.1) avec la condition d'orthonormalité des orbitales, conduit aux deux ensembles d'équations,

$$\hat{F}_c \phi_{c_k} = \epsilon_{c_k} \phi_{c_k} \quad (A.2.a)$$

$$\hat{F}_o \phi_{o_m} = \epsilon_{o_m} \phi_{o_m} \quad (A.2.b)$$

où \hat{F}_c est l'opérateur Hartree-Fock pour les orbitales du type "closed-shell" et \hat{F}_o pour les orbitales du type "open-shell". Ces opérateurs sont des fonctions entre autres des constantes γ , α , b et peuvent être combinés pour former un seul opérateur de Hartree-Fock dont l'ensemble des fonctions propres comprend les orbitales des deux types, soit,

$$\hat{F} \phi_i = \varepsilon_i \phi_i \quad (\text{A.3})$$

L'ensemble $\{\phi_i\}$ satisfaisant (A.3) est équivalent mais non identique, aux ensembles satisfaisant les équations (A.2).

L'énergie associée à (A.3) s'écrit,

$$\begin{aligned} E = & \sum_k (H_k + \varepsilon_k) + \gamma \sum_m (H_m + \varepsilon_m) \\ & - \gamma \sum_{km} (2\alpha J_{km} - \beta K_{km}) \\ & - \gamma^3 \sum_{mm} (2\alpha J_{mm} - \beta K_{mm}) \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

où,

$$\alpha = \frac{(1 - a)}{(1 - f)} \quad (\text{A.5.a})$$

$$\beta = \frac{(1 - b)}{(1 - f)} \quad (\text{A.5.b})$$

Un cas fréquemment rencontré est celui où les orbitales du sous-niveau de type "open-shell" ont toutes un seul électron de spin $+\frac{1}{2}$ par exemple. C'est l'état fondamental de cette configuration et la fonction d'onde est un seul déterminant de Slater. Les valeurs des constantes sont dans ce cas,

$$\gamma = \frac{1}{2} \quad , \quad a = 1 \quad , \quad b = 2 \quad (A.6)$$

ou, utilisant les équations (A.5),

$$\alpha = 0 \quad , \quad \beta = -2 \quad (A.7)$$

ANNEXE B

Notation d'une base.

Considérons C_2H_2 utilisant une base minimum. Chaque H sera formé de une FS 1s et chaque C sera formé de une FS 1s, une FS 2s et une FS $2p_x$, une FS $2p_y$, une FS $2p_z$. On note cela; (2s 1p / 1s). Donc, pour une base double-zéta on notera; (4s 2p / 2s). Si on ajoute des fonctions de polarisation sur H soit trois FS 2p et sur C cinq FS 3d alors on notera; (4s 2p 1d / 2s 1p). Si on utilise une base FS-3G, donc une base minimum où chaque FS est représentée par une combinaison linéaire de trois FG, alors on notera; (6s 3p / 3s) que l'on contracte à [2s 1p / 1s] utilisant des crochets pour indiquer la contraction.

On peut utiliser les différentes notations pour les atomes séparément. Par exemple, pour le C, la base FS-3 avec une fonction de polarisation pourrait se noter (6s / 3p / 3d) contractée à [2s / 1p / 1d] . On peut encore être plus explicite de la façon suivante; (3 3 / 3 / 3*) contractée à [1 1 / 1 / 1*] où la séquence s,p,d,f est délimitée par des obliques et * indique qu'il s'agit d'une fonction de polarisation.

ANNEXE C

Nouvelle version des sous-routines PACK et UNPACK.

PACK
STORAGE ALLOCATION.

COMPASS 3.6-587.

84/05/22. 19.43.32.

PAGE 1

ADDRESS LENGTH

BINARY CONTROL CARDS.

0 13
13IDENT PACK
END

ENTRY POINTS.

PACK 1+

	ADDRESS	LENGTH	PACK	IDENT	PACK	SUBROUTINE	PACK(WORD, I, J, K, L, MU, ITAG)
0	20010313000000000007			VFO		4270L	PACK, 18/7
1		1	PACK	BSS		1	
2	64710			S87		A1	
	5117000001			SA1		B7+1	
		53110		SA1		X1	
3	20162			LX1		50	
	5127000002			SA2		B7+2	
		53220		SA2		X2	
4	20250			LX2		40	
	36012			IX0		X1+X2	
	5137000003			SA3		B7+3	
5	53330			SA3		X3	
	20336			LX3		30	
	5147000004			SA4		B7+4	
6	53440			SA4		X4	
	20424			LX4		20	
	36434			IX4		X3+X4	
	36004			IXC		X0+X4	
7	5157000005			SA5		B7+5	
	53550			SA5		X5	
	20512			LX5		10	
10	36005			IX0		X0+X5	
	5127000006			SA2		B7+6	
	53220			SA2		X2	
11	36602			IX6		X0+X2	
	56170			SA1		B7	
	53610			SA6		X1	
12	0200000001			JP		PACK	
13				END			

466008 CH STORAGE USED
SERIAL CPU ASSEMBLY32 STATEMENTS
0.226 SECONDS1 SYMBOLS
3 REFERENCES

SYMBOLIC REFERENCE TABLE.

PACK 1 PROGRAM* 1/16 E 1/18 L 1/4

UNPACK
STORAGE ALLOCATION.

COMPASS 3.6-587.

84/05/22. 19.43.33.

PAGE 1

ADDRESS LENGTH BINARY CONTROL CARDS.

0 13 IDENT UNPACK
13 END

ENTRY POINTS.

UNPACK 1+

IDENT UNPACK
SUBROUTINE UNPACK(WORLD,I,J,K,L,MU,ITAG)
ENTRY UNPACK

0	25162001031300000007		VFO	42/0LUNPACK,18/7
1		1	BSS	1
2	43062		MX0	50
	64710		SB7	A1
	53110		SA1	X1
	15610		BX6	-X0*X1
3	5127000006		SA2	B7+6
	53620		SA6	X2
	21112		AX1	10
4	15610		BX6	-X0*X1
	5127000005		SA2	B7+5
	53620		SA6	X2
5	21112		AX1	10
	15610		BX6	-X0*X1
	5127000004		SA2	B7+4
6	53620		SA6	X2
	21112		AX1	10
	15610		BX6	-X0*X1
7	5127000003		SA2	B7+3
	53620		SA6	X2
	21112		AX1	10
10	15610		BX6	-X0*X1
	5127000002		SA2	B7+2
	53620		SA6	X2
11	21112		AX1	10
	15610		BX6	-X0*X1
	5127000001		SA2	B7+1
12	53620		SA6	X2
	0200000001 +		JP	UNPACK
13			END	

446008 CM STORAGE USED
SERIAL CPU ASSEMBLY

33 STATEMENTS
0.172 SECONDS

1 SYMBOLS
3 REFERENCES

SYMBOLIC REFERENCE TABLE.

UNPACK 1 PROGRAM* 1/16 E 1/18 L 1/+5

ANNEXE D

Formats des données pour PA20A et PA20B.

1. (12A6): Etiquette du problème.
2. (24I3): Options d'entrée et de sortie. Si la i ième option est différente de zéro alors
 - I(1) imprime la matrice de transformation étendue.
 - I(2) =N donc imprime les N premiers records.
 - I(10) imprime l'information relative aux différents fichiers.
3. (A6): Le nom du fichier des étiquettes.

Uniquement pour PA20A,
4. (2I3): Le nombre original de fonctions de base (NBF0) et le nouveau nombre de fonctions de base (NBFN).
5. (24I3): Si $NBF0 \neq NBFN$ alors lire le nombre de nouvelles fonctions correspondant à chaque fonction originale.
6. (3I3): Le nombre total de transformations (NTRN), le nombre de transformation du groupe ponctuel (NTRNPT) et le nombre de transformations additionnelles (NADD).
7. (24I3): Si $NTRN \neq 0$ alors lire la matrice de transformations originale (voir le texte).

ANNEXE E

Formats des données pour PA30A et PA30B.

1. (12A6): Etiquette du problème.
 2. (24I3): Options d'entrée et de sortie. Si la i ième option est différente de zéro alors il y aura exécution suivante; $I(1) = N$, imprime les N premiers fichiers d'intégrales.

 $I(10)$ imprime l'information relative aux différents fichiers.
 3. (A6,4X,A6,4X,4I5): Le nom du ruban contenant les étiquettes (LSTNAM) et le nom du ruban contenant les intégrales.
- Uniquement pour PA30A,
4. (2I3): Le nombre de noyaux (NON) et le nombre de centres additionnels (NAC).
 5. (A6,6X,4F12.0): Le nom du noyau, ses coordonnées X,Y,Z et sa charge.
 6. (2I3): Le nombre de primitives (N) et le nombre de fonctions de base (NBFNS).
 7. (36I2): Le nombre de primitives par fonction de base.
 8. (A6,6X,A3,9X,2F12.0): Le nom du centre de la fonction (CNTR), le type (TYP), l'exposant orbital, son coefficient.
Aussi (A6,6X,A3,I3): CNTR, TYP et le numéro d'une fonction précédente (INC).

Uniquement pour PA30B,

4. (2E15.7): Borne inférieure pour les intégrales à deux électrons pour les primitives (ACRCY) et le facteur multipliant ACRCY pour la borne inférieure pour les intégrales à deux électrons pour les fonctions de base (SCALE).

ANNEXE F

Formats des données pour PA40.

1. (12A6): Etiquette du problème.
2. (24I3): Options d'entrée et de sortie. Si la i ième option est différente de zéro alors il y aura exécution suivante; I(18) prévient l'écriture des coefficients des OM à la fin du ruban contenant les intégrales.
3. (A6): Le nom du fichier des intégrales.
4. (2I3): Le nombre total de fonctions de symétrie (NR) et le nombre de fonctions de base (NC).
- 5a. (I3,3x,A6,5X,I1): Le nombre de fonctions de symétrie à être lues dans le bloc (NSYM), le nom du type de symétrie (NAM) et le nombre de coefficients lus par ligne (INCR).
- 5b. (4(I2,F16.0),I2) si INCR 4: Le numéro de la fonction de base et son coefficient dans la fonction de symétrie.
6. (24I3): Le nombre de fonctions associées à chaque fonction de base.
- 7a. (I3): Le nombre de OM de symétrie occupées par bloc.
- 7b. (6F12.0): Occupations fractionnaires.
8. (2F12.0): Le critère de convergence relatif à l'énergie totale (AC) et la borne inférieure pour négliger les intégrales à deux électrons plus petit que ce nombre (CUT).

9. (7I5,5X,2F12.0): Le numéro de l'itération à laquelle la méthode d'extrapolation de la matrice densité débute (ISTR), la dernière itération à laquelle cette technique est utilisée (ICUT), le numéro de l'itération à laquelle la méthode de la moyenne de la matrice densité commence (JSTR), la dernière itération à laquelle cette technique est utilisée (JCUT), le nombre maximum d'itérations (ISTP), le cycle pour la méthode d'extrapolation (ICYEX), le cycle pour la méthode de la moyenne (ICYAV) et les deux constantes pour la méthode de la moyenne pour la matrice présente et précédente (TP, TL) respectivement.

ANNEXE G

Formats des données pour PA41.

Les formats sont identiques à ceux de PA40 à l'exception des changements suivants,

- 7b. (6F12.0): Occupations fractionnaires par paires. Le premier nombre étant pour l'OM "closed-shell" et le deuxième nombre étant pour l'OM "open-shell".
- 7c. (3F12.0): Les coefficients α , β et γ .(Voir annexe A)

ANNEXE H

Formats des données pour PA59.

Les formats sont identiques à ceux de PA30A à l'exception des changements suivants,

2. (24I3): Options d'entrée et de sortie. Si la i ième option est différente de zéro alors il y aura exécution suivante;

I(1)	fait une analyse de population de Mulliken.
I(2)	fait une analyse de population de recouvrement.
I(3)	ne réalise pas la normalisation des fonctions de base.
I(4)	n'imprime pas la matrice de recouvrement.
I(10)	imprime l'information relative aux différents fichiers.
3. Ne pas inclure cette ligne.
9. (I3): Le nombre de types de symétrie (NSYMTF).
10. (I3,3X,A6): Le nombre d'OM par type de symétrie et le nom du type de symétrie.
11. Le fichier des OM généré par PA40 comme sortie.
12. (I3): Le nombre d'OM occupées.
13. (I3,F12.0): Le numéro de l'OM et son occupation fractionnaire.
14. (F12.0): La distance maximum jusqu'à laquelle les intégrales de recouvrement sont considérées.

15. (4I5): Fin du calcul avec quatre zéros.

ANNEXE I

Formats des données pour PA60.

Les formats sont identiques à ceux de PA59 à l'exception des changements suivants,

2. (24I3): Options d'entrée et de sortie. Si la i ième option est différente de zéro alors il y aura exécution suivante; I(10) imprime l'information relative aux différents fichiers.
14. (I3,9X,A6,6X,3F12.0): Le numéro de l'opérateur (MOP), le centre où est référé l'opérateur (ICENT), et ses coordonnées (CX, CY, CZ).
15. (I3,57X): Fin du calcul avec un zéro.

ANNEXE J

Tables des caractères des groupes C_{4v} et D_{4h} .

C_{4v}	E	C_2	$2C_4$	$2\sigma_v$	$2\sigma_d$		
A_1	1	1	1	1	1	z	x^2+y^2, z^2
A_2	1	1	1	-1	-1	R_z	
B_1	1	1	-1	1	-1		x^2-y^2
B_2	1	1	-1	-1	1		xy
E	2	-2	0	0	0	$(x,y)(R_x,R_y)$	(xz,yz)

D_{4h}	E	C_2	$2C_4$	$2C_2'$	$2C_2''$	i	σ_h	$2S_4$	$2\sigma_v'$	$2\sigma_v''$		
A_{1g}	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1		x^2+y^2, z^2
A_{1u}	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1		
A_{2g}	1	1	1	-1	-1	1	1	1	-1	-1	R_z	
A_{2u}	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1	z	
B_{1g}	1	1	-1	1	-1	1	1	-1	1	-1		x^2-y^2
B_{1u}	1	1	-1	1	-1	-1	-1	1	-1	1		
B_{2g}	1	1	-1	-1	1	1	1	-1	-1	1		xy
B_{2u}	1	1	-1	-1	1	-1	-1	1	1	-1		
E_g	2	-2	0	0	0	2	-2	0	0	0	(R_x,R_y)	(xz,yz)
E_u	2	-2	0	0	0	-2	2	0	0	0	(x,y)	